

## Литература

1. Бурханов Г.С., Илюшин А.С., Кольчугина Н.Б., Рыкова Е.А., Хатанова Н.А., Чистяков О.Д. // Изв. РАН, Металлы. 1994. №5. С. 163.
2. Кубашевски О. Диаграммы состояний двойных систем на основе железа. М., 1985.
3. Cannon J.F., Robertson D.L., Hall H.T. // Mater. Res. Bull. 1972. 7, N1. P. 5.
4. Лысенко А.Б. Дис... канд. физ.-мат. наук. Днепрпетровск, 1977.

5. Jonson Q., Wood D.H., Smith C.S., Ray A.E. // Acta Cryst. 1968. B24. P. 274.
6. Теслюк М.Ю. Металлические соединения со структурами фаз Лавеса. М., 1963.
7. Wang F.E., Glifrich J.V. // Acta Cryst. 1966. 21. P. 476.
8. Buschow K.H. // Phys.Stat.Solidi (a). 1971. 7, N1. P. 199.

Поступила в редакцию  
25.06.96

УДК 539.21:536.4

## БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В СПЛАВЕ Fe-5 ат. % Re

В.М. Силонов, Л. Энхтор

(кафедра физики твердого тела)

Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей установлено существование ближнего порядка в сплаве Fe-5 ат. % Re и определены его параметры.

Ближний порядок в расположении атомов компонентов твердого раствора является фундаментальным явлением. Он установлен более чем в шестидесяти системах [1], среди которых, однако, твердые растворы на основе железа представлены мало, несмотря на их широкое практическое применение. Так, ближний порядок был изучен лишь в ОЦК сплавах Fe-Al, Fe-Mo и Fe-W и ГЦК сплавах Fe-Pt, Fe-Pd и Fe-Ni. Поскольку данные о ближнем порядке используются как при создании новых прецизионных сплавов, так и при анализе аномальных изменений их физических свойств, то важным является расширение круга ОЦК сплавов на основе железа. Цель данной работы состояла в установлении факта существования ближнего порядка в системе железо-рений.

Образец сплава Fe-5 ат.% Re был выплавлен из чистых шихтовых материалов в атмосфере чистого аргона и подвергнут многократной переплавке при перемешивании магнитным полем. Образец шлифовался на наждачных бумагах с постепенным уменьшением размера зерна и полировался на алмазной пасте до получения зеркальной поверхности.

Измерение интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) было проведено на рентгеновском дифрактометре (Fe  $K_{\alpha}$ -излучение, плоский монохроматор - монокристалл кремния (111)). Для регистрации был использован сцинтилляционный счетчик БДС-6 (точность 3-4%).

Интенсивность излучения, рассеянного образцом, была приведена к электронным единицам путем нормировки их на интенсивность, рассеянную плавленым кварцем. Затем из интенсивности ДРРЛ вычитались интенсивности рассеяния воздухом, комптоновского и двойного брэгговского рассеяния по методике, описанной в работе [2]. После этого интенсивность ДРРЛ за вычетом побочных состав-

ляющих записывалась в виде

$$J_i(x_j) = n C_A C_B (F_A - F_B)^2 \sum_{i=0}^{i_{\max}} \alpha_i \left[ C_i \frac{\sin q_j r_i}{q_j r_i} + E_i(x_j) + F_i(x_j) \right], \quad (1)$$

где  $n$  - число атомов в элементарной ячейке;  $C_A$  и  $C_B$  - концентрации компонентов сплава;  $f_A$  и  $f_B$  - факторы атомов компонентов с учетом поправки  $\Delta f'$ ,  $\Delta f''$  на аномальную дисперсию;  $x_j = a q_j / (2\pi)$ ;  $q_j = 4\pi \sin \theta_j / \lambda$ ;  $a$  - параметр кристаллической решетки;  $\lambda$  - длина волны рентгеновского излучения;  $\theta_j$  - угол Вульфа-Брэгга для  $j$ -й экспериментальной точки;  $\alpha_i$  и  $C_i$  - соответственно параметр ближнего порядка и координационное число на  $i$ -й координационной сфере;  $E_i(x_j)$  и  $F_i(x_j)$  - соответственно модулирующие функции линейного и квадратичного размерного эффекта. В модели Борна-Бегби функции  $E_i(x_j)$  и  $F_i(x_j)$  зависят от отношений модулей упругости  $C_{12}/C_{11}$ ,  $C_{44}/C_{11}$  и производной по концентрации  $\beta = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial C_B}$  следующим образом:

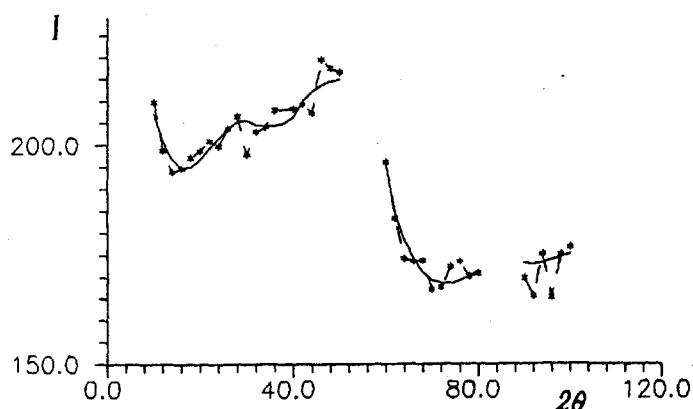
$$E_i(x_j) = -2[(f_A(x_j) - f_B(x_j))] \langle f(x_j) \rangle n C_A C_B \beta I_1(i, x_j), \quad (2)$$

$$F_i(x_j) = \langle f(x_j) \rangle^2 n C_A C_B \beta^2 I_2(i, x_j), \quad (3)$$

где  $V$  - объем элементарной ячейки;  $\langle f(x_j) \rangle = C_A f_A + C_B f_B$  - средний атомный фактор компонентов сплава.

В работе [3] функции  $I_1(i, x_j)$  и  $I_2(i, x_j)$  затабулированы для различных наборов отношений  $C_{12}/C_{11}$  и  $C_{44}/C_{11}$ . Значения упругих постоянных сплава Fe-5 ат.% Re, рассчитанные с использованием модельного потенциала [4] согласно [5], составляют  $C_{11} = 24,9 \cdot 10^{10}$ ,  $C_{12} = 14,7 \cdot 10^{10}$  и  $C_{44} = 12,2 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>.

Из результатов измерений интенсивности ДРРЛ твердого раствора Fe-5 ат.% Re (рисунок) видно, что кривая зависимости ДРРЛ от угла скольжения



Экспериментальная (звездочки) и синтезированная (сплошная линия) кривая ДРПЛ сплава Fe – 5 ат.% Re (интенсивность  $I$  – в электронных единицах, угол скольжения  $2\theta$  – в градусах)

$2\theta$  данного образца не имеет диффузного максимума, характерного для концентрированных растворов. Для уточнения факта существования ближнего порядка необходимо провести качественный и количественный анализ этих данных.

Численные расчеты параметров ближнего порядка проводились методом наименьших квадратов. Известно, что эти параметры, определяемые из ДРПЛ, могут зависеть от концентраций компонент  $C$ , температуры Дебая  $T_D$  и параметра статических смещений  $\beta$ . Поэтому мы вначале уточняли значения  $C$ ,  $T_D$  и  $\beta$ , а затем вычисляли параметры ближнего порядка, с использованием которых строили синтезированную кривую интенсивности ДРПЛ и рассчитывали сумму квадратичных отклонений. Минимальное значение суммы среднеквадратичных отклонений, найденное с помощью варьирования значений  $C$ ,  $T_D$  и параметра  $\beta$  соответствовало следующим величинам:  $C = 5$  ат.% Re;  $T_D = 595$  К;  $\beta = 0,05$ . Найденное методом ДРПЛ значение концентрации 5 ат.% Re совпадает с концентрацией по навеске. Величина дебаевской характеристической температуры сплава существенно превышает дебаевскую температуру железа (445 К). Аналогичный рост  $T_D$  при легировании железа вольфрамом наблюдался в работах [6,7]. Отметим, что в [7] повышение  $T_D$  было найдено по температурным измерениям ин-

тенсивности структурных рефлексов. Значение параметра статистических искажений  $\beta$  оказалось существенно ниже рассчитываемого по зависимости параметра кристаллической решетки от концентрации.

Рассчитанные параметры ближнего порядка на первых четырех координационных сферах сплава Fe–5 ат.% Re соответственно равны  $-0,02$ ;  $0,03$ ;  $-0,005$ ;  $0,01$ . Выявленное чередование знаков характерно для твердых растворов с ближним порядком.

Для оценки достоверности полученных значений концентрации компонент  $C$ , температуры Дебая  $T_D$ , параметра искажений  $\beta$  и параметров ближнего порядка  $\alpha_i$  рассчитывалась синтезированная кривая интенсивности ДРПЛ  $I_{\text{syn}}(2\theta)$  (рисунок), которая сравнивалась с экспериментальной  $I_{\text{exp}}(2\theta)$ . Значения  $I_{\text{syn}}(2\theta)$  включают в себя помимо вкладов лауэвского, теплового, комптоновского и двойного брэгговского рассеяний, зависящих от концентраций компонентов и температуры Дебая, также вклад, обусловленный эффектами статических смещений и ближним порядком. Из рисунка видно, что экспериментальная и синтезированная кривые интенсивности ДРПЛ сплава Fe–5 ат.% Re близки.

Таким образом, в сплаве Fe–5 ат.% Re установлено существование слабого ближнего порядка.

#### Литература

1. Ивернова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М., 1977.
2. Сионов В.М., Энхтор Л. // ФММ. 1995. 80, №5. С. 79.
3. Кацнельсон А.А., Крисько О.В., Сионов В.М., Скоробогатова Т.В. Деп. ВИНТИ №4751. М., 1983.
4. Animalu A.O.E. // Phys. Rev. 1973. В8, N8. P. 3542.
5. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М., 1963.
6. Кацнельсон А.А., Сионов В.М., Абу Аль Шамлат Салама // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1994. №5. С. 66 (Moscow University Phys. Bull. 1994. N5. P. 56).
7. Ильина В.А., Крицкая В.К., Курдюмов Г.В. и др. // ФММ. 1957. 4, №3. С. 417.

Поступила в редакцию  
11.10.96