



ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

ГРАЕВСКАЯ ЯДВИГА ИВАНОВНА

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕИДЕАЛЬНОСТИ  $\alpha$  - ТВЕРДЫХ  
РАСТВОРОВ  $Ag-Mg$ ,  $Cu-Mg$  и  $Cu-Sn$ .

О1.04.07 - физика твердого тела

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедрах физики твердого тела и общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Научные руководители: Доктор физико-математических наук,  
профессор В.И.МЕЕРОНОВА

Доктор физико-математических наук,  
профессор А.А.КАЦНЬЕЛЬСОН.

Официальные оппоненты: Доктор технических наук,  
профессор Ю.А.СКАКОВ.

Кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник Н.Т.ТРАИНА.

Будущее предприятие - Грузинский политехнический институт  
им. В.И.Ленина.

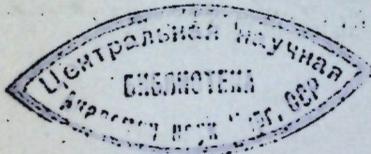
Защита состоится " \_\_\_\_\_ 1976г. в \_\_\_\_\_ час.  
на заседании Специализированного Совета № I отделения Физики  
твердого тела в Московском государственном университете  
имени М.В.Ломоносова, шифр К-13/47 по адресу: Москва, Ленинские горы,  
МГУ, Физический факультет, ауд. \_\_\_\_\_

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического  
факультета МГУ.

Автороферат разослан " \_\_\_\_\_ 1976г.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО УЧЕНОГО  
СОВЕТА № I ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА  
кандидат физико-математических наук

/Н.Д.ГАВРИЛОВА/



Получение материалов с наперед заданными физическими свойствами является одной из актуальных проблем физики твердого тела. Часть этой проблемы представляет собой исследование структуры металлических сплавов и связи их тонкой структуры со свойствами сплавов. В процессе различной обработки сплава может меняться его тонкая структура, в частности, характер расположения атомов по узлам решетки. В связи с этим получение информации о тонкой структуре сплавов является важной задачей.

Прямыми методами исследования взаимного расположения атомов в решетке являются дифракционные методы, а для исследования характера отклонений твердого раствора от идеального, в частности, установления ближнего порядка того или иного знака, метод, основанный на анализе распределения в пространстве диффузного рассеяния рентгеновских лучей.

Исследование ближнего порядка в сплавах этим методом проводилось на большом числе систем [2], но в основном на сплавах с широкой областью растворимости при комнатных температурах, так что при охлаждении сплава раствор не становился пересыщенным.

Целью диссертационной работы являлось:

1/. Исследование неидеальности  $\alpha$  - сплавов, полученных на основе элементов I-ой группы системы элементов Менделеева серебра и меди с металлами других групп: магний из II группы и оловом из IV. Согласно правилу Фриделя [1] в этих сплавах должен существовать ближний порядок.

2/ Исследование характера неидеальности в сплавах с различной растворимостью при комнатных температурах. При повышенных температурах в системах  $Ag - Mg$ ,  $Cu - Mg$   
1-2656

и  $Cu - Sn$  существует широкая область растворимости второго компонента в серебре или меди соответственно. Однако, растворимость магния в серебре практически не зависит от температуры и при понижении ее в этой системе возникает дальний порядок, а в системах  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  растворимость резко падает с понижением температуры.

Следует отметить также, что размерный фактор для сплавов на основе серебра меньше, чем для сплавов на основе меди, поэтому данные о неидеальности этих сплавов имеют несомненный интерес.

3/ Выяснение особенностей характера ближнего порядка и определение энергий упорядочения сплава  $Ag - Mg$ , обладающего в области  $\alpha$  - фазы не совсем обычной длиннопериодной сверхструктурой  $Ag_3Mg$ .

4/ Выяснение возможности использования методики измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей от поликристаллов для обнаружения начальных стадий распада сплавов и определения размера и количества выпадающих зародышей новой фазы.

Установление характера неидеальности  $\alpha$  - сплавов  $Ag - Mg$ ,  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  проводилось методом измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей поликристаллическими закаленными образцами. Для большей части исследованных сплавов были проведены также измерения истинной теплоемкости  $C_p$  в интервале температур от  $40^\circ$  до  $600^\circ C$ .

В настоящей работе установлено, что дальний порядок в  $\alpha$  - сплавах  $Ag - Mg$  существует при отклонении от стехиометрического состава  $Ag_3Mg$  вплоть до состава  $Ag$  с 19 ат.-%  $Mg$  и показано, что сверхструктура типа  $Ag_3Mg$  может быть охарактеризована с помощью двух параметров дальнего порядка.

Впервые установлено существование ближнего порядка в  $\alpha$  - сплавах  $Ag - Mg$  и определены его параметры и характер для сплавов различных концентраций.

Оценены значения энергий упорядочения в сплавах  $Ag$  с 12, 17 и 19 ат.-%  $Mg$  и их относительные температуры упорядочения  $\frac{T_c}{T}$ , где  $T$  - температура, для которой определены параметры ближнего порядка. Формулы для расчета  $\frac{T_c}{T}$  получены в диссертации для разных типов сверхструктур.

При исследовании  $\alpha$  - сплавов  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  обнаружена начальная стадия их распада и разработан метод определения размера и количества выпадающих зародышей по анализу диффузного рассеяния рентгеновских лучей от поликристаллов.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав и выводов, содержит 142 страницы, 31 рисунок и 97 литературных ссылок.

Первая глава диссертации, являющаяся литературным обзором, включает в себя рассмотрение теории рассеяния рентгеновских лучей твердыми растворами, связи параметров ближнего порядка и энергий упорядочения, а также связи температуры перехода порядок-беспорядок  $T_c$  сплавов и их энергий упорядочения.

В одном из параграфов дан обзор экспериментальных работ, посвященных исследованию структуры богатых серебром сплавов  $Ag - Mg$  и богатых медью  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$ .

Атомному упорядочению сплавов  $Ag - Mg$  посвящено сравнительно небольшое количество работ, в которых исследовалась и обсуждалась сверхструктура  $Ag_3Mg$ , причем полного согласия в вопросе о структуре ее ячейки в литературе нет. Сложность существования упорядоченной фазы  $Ag_3Mg$  в настоящее время точно не определена. О ближнем порядке в сплавах  $Ag - Mg$  в литературе никаких данных не имеется.

и  $Cu - Sn$  существует широкая область растворимости второго компонента в серебре или меди соответственно. Однако, растворимость магния в серебре практически не зависит от температуры и при понижении ее в этой системе возникает дальний порядок, а в системах  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  растворимость резко падает с понижением температуры.

Следует отметить также, что размерный фактор для сплавов на основе серебра меньше, чем для сплавов на основе меди, поэтому данные о неидеальности этих сплавов имеют несомненный интерес.

3/ Выяснение особенностей характера ближнего порядка и определение энергий упорядочения сплава  $Ag - Mg$ , обладающего в области  $\alpha$  - фазы не совсем обычной длиннопериодной сверхструктурой  $Ag_3Mg$ .

4/ Выяснение возможности использования методики измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей от поликристаллов для обнаружения начальных стадий распада сплавов и определения размера и количества выходящих зародышей новой фазы.

Установление характера неидеальности  $\alpha$  - сплавов  $Ag - Mg$ ,  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  проводилось методом измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей поликристаллическими закаленными образцами. Для большей части исследованных сплавов были проведены также измерения истинной теплоемкости  $C_p$  в интервале температур от  $40^\circ$  до  $600^\circ C$ .

В настоящей работе установлено, что дальний порядок в  $\alpha$  - сплавах  $Ag - Mg$  существует при отклонении от стехиометрического состава  $Ag_3Mg$  вплоть до состава  $Ag$  с 19 ат.%  $Mg$  и показано, что сверхструктура типа  $Ag_3Mg$  может быть охарактеризована с помощью двух параметров дальнего порядка.

Впервые установлено существование ближнего порядка в  $\alpha$  - сплавах  $Ag - Mg$  и определены его параметры и характер для сплавов различных концентраций.

Оценены значения энергий упорядочения в сплавах  $Ag$  с 12, 17 и 19 ат.%  $Mg$  и их относительные температуры упорядочения  $\frac{T_c}{T}$ , где  $T$  - температура, для которой определены параметры ближнего порядка. Формулы для расчета  $\frac{T_c}{T}$  получены в диссертации для разных типов сверхструктур.

При исследовании  $\alpha$  - сплавов  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  обнаружена начальная стадия их распада и разработан метод определения размера и количества выходящих зародышей по анализу диффузного рассеяния рентгеновских лучей от поликристаллов.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав и выводов, содержит 142 страницы, 31 рисунок и 97 литературных ссылок.

Первая глава диссертации, являющаяся литературным обзором, включает в себя рассмотрение теории рассеяния рентгеновских лучей твердыми растворами, связи параметров ближнего порядка и энергий упорядочения, а также связи температуры перехода порядок-беспорядок  $T_c$  сплавов и их энергий упорядочения.

В одном из параграфов дан обзор экспериментальных работ, посвященных исследованию структуры богатых серебром сплавов  $Ag - Mg$  и богатых медью  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$ .

Атомному упорядочению сплавов  $Ag - Mg$  посвящено сравнительно небольшое количество работ, в которых исследовалась и обсуждалась сверхструктура  $Ag_3Mg$ , причем полного согласия в вопросе о структуре ее ячейки в литературе нет. Область существования упорядоченной фазы  $Ag_3Mg$  в настоящее время точно не определена. О ближнем порядке в сплавах  $Ag - Mg$  в литературе никаких данных не имеется.

Сплавы на основе меди, как известно, широко используются на практике. Явление упорядочения впервые было обнаружено на системе  $Cu - Au$ . С тех пор изучен ближний порядок в системах  $Cu - Au$ ,  $Cu - Pt$ ,  $Cu - Pd$ ,  $Cu - Ni$ ,  $Cu - Al$ ,  $Cu - Zn$ . О ближнем же порядке в сплавах  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  в литературе никаких сведений не имеется. Большое число работ посвящено распаду твердых растворов  $Cu - Sn$  но в областях более богатых оловом, чем  $\alpha$ -фаза. Сообщений об исследованиях диффузного рассеяния рентгеновских лучей при распаде  $\alpha$ -твердых растворов  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  в литературе нет.

Вторая глава посвящена использованной методике приготовления образцов, измерений интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей поликристаллами [3] и истинной теплоемкости сплавов [4]. Рассмотрены также методы расчета параметров ближнего порядка, энергий упорядочения и температур упорядочения сплавов.

Диффузное рассеяние рентгеновских лучей измерялось на дифрактометре УРС50И. Измерения проводились на монохроматизированном  $CoK\alpha$  или  $CuK\alpha$  излучении. Для уменьшения вертикальной расходимости первичного пучка и исключения основной части рассеяния воздухом использовались коллиматоры.

Интенсивность диффузного рассеяния измерялась для  $X = \frac{2a \sin \theta}{\lambda}$  от  $X = 0,550$  до  $X = 3,225$  с интервалом 0,075, исключая промежутки около структурных линий. Относительная ошибка измерений  $\frac{1}{N} = 0,03$ . Для определения наличия и положения сверхструктурных линий сплавов  $Ag - Mg$  изме-

рения на упорядоченных образцах были проведены с интервалом в 5 раз меньше.

Измерения температурного хода теплоемкости сплавов  $C_p$  осуществлялось в адиабатическом калориметре в атмосфере чистого аргона при атмосферном давлении.

Образцы, использованные для тепловых и рентгеновских исследований, были приготовлены из одних и тех же слитков сплавов, полученных нами из чистых (99,96%) металлов и затем гомогенизированных в течение 25-30 часов при температуре на  $50^\circ$  ниже линии солидуса.

На основании формулы, полученной М.А.Кривоглазом [5], а позднее Клешном и Моссом [6] для температуры упорядочения  $T_c$  мы получили формулы расчета  $T_c$  сплавов  $Ag_3 Mg$  и  $Ni_3 V$ .

Из структурных факторов длиннопериодных структур  $Ag_3 Mg$  и  $Ni_3 V$  следует, что в этих сплавах существует 2 типа сверхструктурных линий с различной интенсивностью. Для сверхструктурных линий 110, 112, 130; 001, 021, 221 сплава  $Ag_3 Mg$  и 001, 021, 221 сплава  $Ni_3 V$  (индексы линий даны в индексах неупорядоченной ячейки).

$$\frac{T_c}{T} = 8c_A c_B \frac{v_1}{kT} \left( 1 - \frac{3}{2} \frac{v_2}{v_1} + 2 \frac{v_3}{v_1} \right) \quad (I)$$

Формула (I) совпадает с формулой, полученной Клешном и Моссом для  $Cu_3 Au$ .

Для сверхструктурных линий 10 1/4, 10 3/4, 12 1/4, ...  $Ag_3 Mg$

$$\frac{T_c}{T} = 8c_A c_B \frac{v_1}{kT} \left(1 - \frac{v_2}{v_1}\right) \quad (2)$$

Для сверхструктурных линий  $10\ 1/2$ ,  $10\ 3/2$ ,  $12\ 1/2$ ,  $12\ 3/2$

$Ni_3V$

$$\frac{T_c}{T} = 8c_A c_B \frac{v_1}{kT} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{v_2}{v_1} - 2 \frac{v_3}{v_1}\right) \quad (3)$$

В формулах (1-3)  $k$  - постоянная Больцмана,

$v_1$ ,  $v_2$  и  $v_3$  - энергии упорядочения на 1, 2 и 3 координационных сферах соответственно,  $T$  - температура, для которой определены параметры ближнего порядка.

В третьей главе приведены результаты эксперимента и их обсуждение.

Внешний вид кривых истинной теплоемкости  $c_p = f(t)$  для сплавов  $Ag - Mg$  показывает, что дальний порядок существует не только в сплаве  $Ag$  с 25 ат.%  $Mg$ , но и в сплаве  $Ag$  с 19 ат.%  $Mg$ . На это указывает наличие максимума теплоемкости при температуре  $310^\circ C$ . В 17% сплаве ход теплоемкости, по-видимому, отражает разрушение ближнего порядка при нагреве образца.

В соответствии с температурным ходом истинной теплоемкости сплавов были выбраны температуры отжига образцов, использованных для рентгеновских исследований.

На дифрактограммах сплавов  $Ag$  с 25 и 19 ат.%  $Mg$ , отожженных 3 часа при температуре  $250^\circ C$  с последующей закалкой в вакуумное масло хорошо видны сверхструктурные линии, интенсивность которых для сплава с 25 ат.%  $Mg$  больше, чем для

сплава с 19 ат.%  $Mg$ . Сверхструктурные линии, появившиеся на дифрактограммах исследованных сплавов, расположены там, где им надлежит быть для сверхструктурной ячейки  $Ag_3 Mg$ , установленной в работах [7] и [8].

Структуру  $Ag_3 Mg$  можно представить как 8 о.ц.к подрешеток. Введя вероятности нахождения атомов магния в различных подрешетках, можно выразить через них интенсивности всех возможных отражений и ввести параметры дальнего порядка. Используя соображения симметрии и имеющиеся потасания, можно свести число этих параметров к двум  $S_1$  и  $S_2$ , что и было сделано в настоящей работе. Тогда интенсивности сверхструктурных линий будут определяться через

$$|F_I| = 2\sqrt{2} (f_{Ag} - f_{Mg}) S_1$$

$$F_{II} = 4 (f_{Ag} - f_{Mg}) S_2$$

На дифрактограммах сплавов  $Ag$  с 12, 17 и 19 ат.%  $Mg$ , отожженных при  $600^\circ C$  в течение 8 часов с закалкой, были зарегистрированы диффузные максимумы, свидетельствующие о наличии в сплавах ближнего порядка.

По интенсивности диффузного рассеяния, обусловленной ближним порядком и статическим смещениями атомов, методы наименьших квадратов для сплавов  $Ag - Mg$  были определены значения  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1 - \alpha_4$ ,  $\alpha_g$  и  $\alpha_g^2$ , приведенные в таблице.

Для всех исследованных сплавов при вышеуказанной обработке обнаруживается ближний порядок ( $\alpha_1 < 0$ ;  $\alpha_2 > 0$ ).

Таблица

ат. % Mg	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_0$	$\alpha_1$ пред.
12	-0,13	0,24	-0,01	0,06	1,14	-0,14
17	-0,13	0,25	0,06	0,01	1,00	-0,20
19	-0,13	0,26	0,12	-0,04	1,22	-0,24

Параметр  $\alpha_3$  меняет знак от значения  $< 0$  до значения  $> 0$  при увеличении концентрации магния ( в диссертации получены параметры близкого порядка и для других обработок образцов).

Если сопоставить полученные значения параметров близкого порядка со значениями их для стехиометрического состава  $A_3B$  при полном дальнем порядке для различных сверхструктур, реализуемых на базе г.ц. кубической решетки, то становится очевидным, что для сплавов, содержащих 17 - 19 ат. % Mg, характер, полученных параметров  $\alpha_i$  согласуется лучше с данными для сверхструктуры типа  $Ni_3V$ , чем  $Ag_3Mg$ . Для сплава Ag с 12 ат. % Mg прототипом близкого порядка может служить как  $Cu_3Au$ , так и  $Ag_3Mg$ .

По приведенным значениям параметров  $\alpha_1 - \alpha_4$  для сплавов Ag - Mg по формулам, полученным Клеппом и Моссом, были рассчитаны энергии упорядочения для первых трех координационных сфер. Результаты расчета приведены в таблице.

ат. % Mg	$\frac{U_1}{KT}$	$\frac{U_2}{KT}$	$\frac{U_3}{KT}$	$\frac{U_2}{U_1}$	$\frac{U_3}{U_1}$
12	0,41	-0,76	-0,09	-1,86	-0,22
17	0,38	-0,67	-0,24	-1,76	-0,63
19	0,40	-0,63	-0,33	-1,57	-0,83

На основании формул (1-3), приведенных выше, было рассчитано отношение  $\frac{T_c}{T}$  для исследуемых сплавов Ag - Mg. Результаты расчета приведены в таблице.

ат. % Mg	$T_c/T$		
	по формуле (1)	по формуле (2)	по формуле (3)
12	1,16	0,98	0,82
17	1,02	1,18	1,34
19	0,84	1,26	1,69

Необходимо отметить, что значения  $\frac{T_c}{T}$  получились завышенными и многие из них  $> 1$ . Это связано с тем, что в формулы (1-3) не введен множитель, зависящий от отклонения состава сплава от стехиометрического и существенно снижающий  $T_c$ . Из сравнения значений  $\frac{T_c}{T}$  для разных сверхструктур одного состава сплава видно, что для 17 и 19 ат. % сплавов наи-

более высокой является температура упорядочения по типу  $Ni_3V$ , поэтому в процессе закалки возникает соответствующий ближний порядок. Для 12% сплава при повышенных температурах более устойчивым является ближний порядок по типу структуры  $Cu_3Au$ . Эти рассуждения подтверждают выводы о зависимости типа ближнего порядка от состава сплавов  $Au - Mg$ .

Диффузное рассеяние сплавами  $Cu - Sn$  и  $Cu - Mg$  измерялось для образцов, отожженных при температуре  $650^\circ C$  в течение 2-х часов с закалкой в вакуумное масло и последующей выдержкой при комнатной температуре в течение 3-х и 8 месяцев. На дифрактограммах всех исследованных образцов наблюдается диффузный максимум, который существенно сдвинут от положения сверхструктурной линии (100), т.е. от положения  $X = 1$ .

Следует отметить, что выделить этот диффузный максимум можно только используя методику измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей за счет ближнего порядка, т.е. исключив все побочные составляющие фона, особенно рассеяние воздухом и тепловое диффузное рассеяние. Кроме этого, необходимо дополнительно исключить рассеяние за счет квадратичного размерного эффекта.

Экспериментальный диффузный максимум был рассмотрен с двух точек зрения: а) как диффузный максимум, вызванный наличием в сплаве ближнего порядка и б) как структурный максимум фазы выделения. Поэтому, сначала были рассчитаны параметры ближнего порядка и линейного размерного эффекта. Полученные значения параметров ближнего порядка оказались в некоторых случаях слишком большими. Их абсолютные значения для сплавов  $Cu - Sn$  могут быть объяснены только возникновением областей

$Cu_3Sn$  внутри свободной от олода матрицы.

Второе рассмотрение основано в первую очередь на том, что диффузные максимумы полученных экспериментальных кривых расположены вблизи наиболее сильных линий фаз  $Cu_2Mg$  и  $Cu_3Sn_2$  при углах  $\vartheta$  меньших, чем первые линии  $Cu$ .

Известно, что образование зародышей новой фазы приводит к появлению интенсивного диффузного рассеяния в окрестности узлов обратной решетки матричной и новой фаз.

Если частицы имеют сферическую форму и отличаются структурой от матричной фазы, то интенсивность диффузного рассеяния монокристаллом в окрестностях узлов обратной решетки матричной фазы будет равна [9]

$$I_i = N_0 |\varphi_q(\vec{q}_i)|^2, \text{ где}$$

$$\varphi_q(\vec{q}_i) = 3f \frac{n}{v} \left[ \zeta(qr_0) - \alpha' \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}_1}{q^2} \frac{\sin q r_0}{q r_0} \right]$$

$$\zeta(qr_0) = \frac{qr_0 \cos qr_0 - \sin qr_0}{(qr_0)^3}$$

$N_0$  - число выпавших частиц новой фазы в единице объема.

$v$  - число атомов в ячейке матрицы.

$n$  - число атомов матрицы в объеме частицы новой фазы.

$f$  - структурный фактор матрицы

$\alpha'$  - коэффициент искажений

$r_0$  - радиус частицы новой фазы.

$$\vec{q} = \vec{q}_1 - \vec{H}, \quad |\vec{q}_1| = \frac{4\pi \sin \vartheta}{\lambda}; \quad |\vec{H}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\sum h_i^2}$$

В отсутствие искажений, когда  $\alpha' = 0$ , формула описывает

сферически симметричное колоколообразное распределение интенсивности вокруг каждого узла обратной решетки матрицы. Слагаемое, связанное с искажениями играет существенную роль только при достаточно малых  $q$ , т.е. вблизи узлов обратной решетки матрицы.

Значительно меньше влияют искажения на распределение интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки новой фазы. В этом случае

$$\varphi_2(\vec{q}_1) = 3 \frac{1}{4} \frac{h}{v} \frac{1}{2} (\varrho_0 \zeta_0)$$

где  $\vec{r}_0$  - расстояние от узла обратной решетки новой фазы.

Т.к. мы работали с поликристаллическими образцами, то мы получили выражение для поликристаллов, аналогично тому, как это сделано в работе [10] в случае размерного эффекта

$$J_1 = N_0 \rho \left(\frac{h}{v}\right)^2 \int_0^{\varrho_{\max}} \left[ \frac{1}{2} (\varrho_0)^2 - 2 \alpha' \frac{1}{2} (\varrho_0) \cdot \frac{\vec{q} \vec{q}_1}{\varrho^2} \frac{\sin(\varrho \zeta_0)}{\varrho \zeta_0} + \frac{\alpha_i^2 (\vec{q} \vec{q}_1)^2 \sin^2(\varrho \zeta_0)}{\varrho^4 (\varrho_0)^2} \right] \frac{\sin \gamma d\varrho}{2}$$

где  $\gamma$  - угол между векторами  $\vec{q}$  и  $\vec{H}$ . Интегрирование ведется в пределах диффузного облака, имеющего форму шара, объем которого равен объему первой зоны Бриллюэна.  $\vec{q}$  меняется от  $\varrho_{\min} = |\vec{q}_1 - \vec{H}|$  до  $\varrho_{\max} = \frac{2\pi}{a}$

Решение было получено в аналитической форме, но т.к. оно состоит из многих частей, то численный расчет для радиусов частиц новой фазы  $\zeta_0 = 4, 10, 20$  и  $30 \text{ \AA}$  проводился на ЭВМ-МИР 2.

$N_0$  определялось для равновесного состояния сплава через  $\zeta_0$  и разность исходной концентрации сплава  $C$  и равновесной  $C_1$ . Вектор  $\vec{q}$  для фазы выделения отсчитывался от центров диффузных максимумов на дифрактограммах, совпадающих с положением наиболее сильных первых линий III и  $\epsilon 00$  фаз  $\text{Cu}_2\text{Mg}$  и  $\text{Cu}_{31}\text{Sn}_8$  соответственно.

Высота, рассчитанных по полученным в настоящей работе формулам, диффузных максимумов линейно возрастает, а полуширина их  $\Delta X$  уменьшается с увеличением  $\zeta_0$  при постоянном количестве выпавшей фазы.

Из полуширины экспериментальных кривых мы получили, что диаметр зародышей выпавшей фазы можно оценить в  $8 - 10 \text{ \AA}$  в обоих сплавах. Высота же экспериментальной кривой сплава  $\text{Cu}$  с  $4,5 \text{ ат.}\% \text{ Mg}$  меньше расчетной  $\approx$  в 2 раза. Это показывает, что общее весовое количество выпавшей фазы  $\text{Cu}_2\text{Mg}$  соответственно меньше, того, которое должно было бы быть при равновесном состоянии, установившемся после распада твердого раствора.

Таким образом, использование методики измерения диффузного рассеяния от поликристаллов за счет ближнего порядка позволяет оценить размер, а в благоприятных случаях, и количество выпавших зародышей новой фазы до того, когда выпадающая фаза становится видной на дебаеграммах.

То, что в системе  $\text{Ag} - \text{Mg}$ , обладающей широкой областью растворимости, существует ближний порядок, в то время как сплавы  $\text{Cu} - \text{Mg}$  и  $\text{Cu} - \text{Sn}$  распадаются при охлаждении может быть связано с большим размерным фактором в сплавах на основе меди, чем на основе серебра.

1. Впервые установлено существование ближнего порядка в  $\alpha$ -сплавах  $Ag - Mg$  и определены его параметры для четырех координационных сфер.

Обнаружена зависимость характера ближнего порядка от концентрации сплава. Для сплавов  $Ag$  с 17 и 19 ат.%  $Mg$  ближний порядок устанавливается по типу, приближающемуся к структуре  $Ni_3V$ , а для сплава с 12 ат.%  $Mg$  к  $Cu_3Au$ .

2. Оценены энергии упорядочения  $\alpha$ -сплавов  $Ag - Mg$  для трех координационных сфер. Зависимость энергии упорядочения от межатомного расстояния имеет немонотонный характер, причем модуль энергии упорядочения для второй координационной сферы больше, чем для первой.

3. Уточнена диаграмма состояния системы  $Ag - Mg$  в области  $\alpha$ -фазы, т.к. установлено, что дальний порядок в  $\alpha$ -сплавах  $Ag - Mg$  распространяется вплоть до состава  $Ag$  с 19 ат.%  $Mg$ . Температура перехода порядок - беспорядок для этой концентрации сплава равна  $(310 \pm 2)^\circ C$ .

4. Показано, что сверхструктура  $Ag_3Mg$  может быть охарактеризована двумя параметрами дальнего порядка.

Обнаружено, что полученные экспериментальные результаты согласуются со сверхструктурой, предложенной авторами работ [7] и [8].

5. Обнаружена начальная стадия распада  $\alpha$ -сплавов  $Cu - Mg$  и  $Cu - Sn$  с помощью измерений диффузного рассеяния рентгеновских лучей поликристаллами по методике

исследования ближнего порядка.

6. Разработан метод определения размера выпадающих зародышей и их количества по анализу диффузного рассеяния рентгеновских лучей от поликристаллов, более чувствительный, чем обычный рентгеновский метод исследования поликристаллов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *J. Friedel Adv. Phys.* 3, 446, 1954.
2. В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон.  
Изв. вузов, Физика, № 8, 1976.
3. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич. "Теория рассеяния рентгеновских лучей". Изд. МГУ, 1972.
4. А.И.Минаев. Зав. лабор. № 4, 1967.
5. М.А.Кривоглаз. *ЖЭТФ* 31, 625, 1956; 32, 1368, 1957.
6. *P.C. Clapp, S.C. Moss Phys. Rev.* 171, 754, 1968.
7. *K. Schubert, B. Kieffer, M. Wilkens and R. Hauptler. Z. Metallkunde* 46, 692, 1955.
8. *K. Fujiwara, M. Kirabayashi, D. Watanabe and Shiko Odawa. J. of Phys. Soc. Japan* 13, 112, 167, 1958.
9. М.А.Кривоглаз. "Теория рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов". Наука. М. 1967.
10. В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон. *ФММ.* II, I, 40, 1961.

Основное содержание диссертации опубликовано в следующих работах:

1. Я.И.Граевская, В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон,  
Т.В.Куварлина, И.И.Попова.

"Тезисы докладов IV Всесоюзного совещания по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов" стр.116, Томск 1972г.

2. Я.И.Граевская, В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон, И.И.Попова.  
"Тезисы докладов III-го Всесоюзного совещания по метастабильным совещаниям в сплавах". стр. 92. Тбилиси 1973г.
3. Я.И.Граевская, В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон, И.И.Попова  
"Доклады IV Всесоюзного совещания по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов". ч. II, стр.131, Томск 1974г.
4. Я.И.Граевская, В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон, И.И.Попова.  
*Ф.М.М.* 40, I, 195, 1975.
5. Я.И.Граевская, А.П.Звягина.  
Вестник Московского университета, физ.астр. 3, 1975г.
6. Я.И.Граевская, В.И.Иверонова, И.И.Попова.  
"Тезисы докладов V Всесоюзного совещания по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов".  
стр. 53. Томск, 1976.
7. Я.И.Граевская, А.П.Звягина, В.И.Иверонова.  
"Тезисы докладов V Всесоюзного совещания по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов".  
стр. 53. Томск, 1976г.

Материалы диссертации докладывались на следующих совещаниях: IV и V Всесоюзных совещаниях по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов. Томск, 1972 и 1976г.г.

III Всесоюзном совещании по метастабильным состояниям в сплавах. Тбилиси 1973г.

Подп. к печати	29/X. 76г	Л-54839	Ф.
Физ. п. л.	10	Уч. изд. л. 0,605	Заказ 2656
		Тираж 200	

Изд-во Московского университета, Москва, К-9,  
ул. Герцена, 5/7.  
Типография Изд-ва МГУ. Москва, Ленгоры