

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА

*На правах рукописи*

**Лхамсурэн Энхтор**

**Ближний порядок и статические смещения в бинарных  
поликристаллических твердых растворах замещения с  
различными кристаллическими структурами**

1.3.8 Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва – 2025

Диссертация подготовлена на кафедре физики Института Наук и Свободных Искусств Монгольского государственного университета

**Официальные оппоненты** – **Виницкий Сергей Ильич**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, Международная  
межправительственная научно-  
исследовательская организация  
Объединенный институт ядерных  
исследований, ведущий научный  
сотрудник

**Удодов Владимир Николаевич**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, ФГБОУ ВО «Хакасский  
государственный университет  
им. Н.Ф. Катанова», Инженерно-  
технологический институт, доцент

**Орешко Алексей Павлович**,  
доктор физико-математических наук,  
доцент, ФГБОУ ВО Московский  
государственный университет имени  
М.В.Ломоносова, физический факультет,  
заведующий кафедрой физики твердого  
тела

Защита диссертации состоится «17» апреля 2025 г. в 15:30 часов на заседании диссертационного совета МГУ.013.3 Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: г. Москва, Ленинские горы, д.1 стр. 2, физический факультет, ауд. \_\_\_\_\_

E-mail: [malyshkinaia@my.msu.ru](mailto:malyshkinaia@my.msu.ru)

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/3315>

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук

И.А. Малышкина

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В настоящей работе представлены результаты исследований, выполненных автором на кафедре физики Монгольского государственного университета в период от 1993 по 2024 г.г.

Диссертационная работа посвящена проблеме определения типа ближнего упорядочения в бинарных поликристаллических твердых растворах методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей с учетом статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом, а также оценкам энергий упорядочения с применением экспериментально определенных параметров ближнего порядка и расчетам их методом псевдопотенциала.

**Актуальность темы диссертации.** Ближний порядок в расположении атомов компонент металлических твердых растворов является фундаментальным явлением, от которого зависят прочность, электросопротивление, термо-эдс и магнитные свойства, определяющие применение сплава на практике. Исторически, исследования ближнего упорядочения развернулись в связи с проблемой К-состояния, в котором прочностные характеристики металлических систем достигались при определенном внутреннем устройстве, то есть при возникновении ближнего порядка в расположении атомов компонент. Ближний порядок подразумевает корреляцию во взаимном расположении атомов: при занятии некоторого узла кристаллической решетки атомом сорта А имеется вероятность преимущественного занятия соседних узлов атомами сорта В. Такая межатомная корреляция может распространяться на расстояние нескольких координационных сфер, что обуславливается межатомным взаимодействием.

Установление ближнего порядка в твердых растворах изучается в статистической теории фазовых переходов, в рамках которой Е.М.Лифшицем установлен критерий фазовых переходов первого и второго родов, что имеет важное значение для изучения границы между состоянием с ближним упорядочением и упорядоченным состоянием. Критерий устойчивости однородных твердых растворов связан с экстремумами Фурье-образов энергий упорядочения. А.Г.Хачатурян считал, что в связи с трудностями экспериментального определения параметров ближнего порядка целесообразно рассчитывать Фурье-образы энергий упорядочения непосредственно из интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ). Это утверждение обусловлено тем, что раньше в должном уровне не был развит метод учета вклада статических смещений атомов в интенсивность ДРРЛ твердыми растворами, вследствие чего терялась достоверность экспериментально определяемых параметров ближнего порядка. С применением Фурье-образов энергий упорядочения имеются возможности оценки критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок. Удачные попытки оценки критических температур по упомянутому А.Г.Хачатуряном методу достигнуты в стехиометрических сплавах, где статические смещения атомов, обусловленные различием размеров атомов компонент (т.е. размерным эффектом), малы. Между тем имеются возможности оценки Фурье-образов энергий упорядочения в сплавах нестехиометрических составов со значительным размерным эффектом путем достоверного определения спектра параметров ближнего порядка. Для этого необходимо было развить метод учета вклада статических смещений в интенсивность ДРРЛ.

Традиционными методами исследования ближнего порядка являются методы ДРРЛ, рассеяния электронов и нейтронографии. В последнее время стало применяться синхротронное излучение вместо рентгеновского излучения. Однако, проблема

адекватного учета статических смещений атомов в интенсивностях рассеяний рентгеновского и синхротронного излучений, а также нейтронов твердыми растворами, окончательно не разрешена. При адекватном учете статических смещений атомов имеются возможности достоверного определения параметров ближнего порядка на необходимом числе координационных сфер, с использованием которых в рамках статистической теории упорядочения представляется возможным рассчитывать энергии упорядочения двойных сплавов. Однако А.Г.Хачатурян отмечал, что энергии упорядочения сплавов сложным и неявным образом зависят от параметров ближнего порядка. Хотя за последние тридцать лет предпринимались попытки уточнения уравнений, связывающих энергии упорядочения с параметрами ближнего порядка, эта задача все еще остается актуальной. С другой стороны, проблема прогноза существования ближнего порядка через значения энергий упорядочения, которые можно рассчитать теоретическими квантовомеханическими методами, полностью не решена. Для одной трети всех изученных двойных сплавов на предмет выявления ближнего порядка не удастся корректно прогнозировать методом модельного потенциала существование ближнего порядка.

Актуальность настоящего исследования определяется необходимостью достоверного определения параметров ближнего порядка в двойных сплавах со значительным размерным эффектом методом ДРРЛ, развития методики расчета энергий упорядочения через экспериментальные значения параметров ближнего порядка с последующей оценкой критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок, а также прогноза существования ближнего порядка в рамках метода псевдопотенциала.

**Цель работы** состояла в развитии экспериментальных и теоретических методов определения параметров ближнего порядка в поликристаллических сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами. Достижение этой цели потребовало решения следующих задач:

1. Усовершенствование экспериментального метода ДРРЛ для определения параметров ближнего порядка в двойных поликристаллических сплавах с учетом вклада статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом.
2. Развитие метода расчета амплитуд волн статических смещений атомов компонент сплава с применением динамической матрицы и Фурье-образов квазиупругих сил межатомного взаимодействия.
3. Развитие методик расчетов силовых постоянных межатомного взаимодействия и модулей упругости металлов и сплавов на основе метода псевдопотенциала. Разработка методики оценки силовых постоянных и модулей упругости металлов и сплавов из экспериментальных данных фононных спектров с применением выражений динамических матриц.
4. Развитие методики расчета энергий упорядочения через экспериментальный спектр параметров ближнего порядка с применением уравнений статистической теории упорядочения сплавов. Апробация уравнений Каули и Кривоглаза-Клэппа-Мосса для оценки критических температур фазового перехода порядок-беспорядок в изученных сплавах с применением энергий упорядочения, полученных через экспериментальные значения параметров ближнего порядка.
5. Усовершенствование методики прогноза ближнего порядка в двойных сплавах замещения в рамках метода псевдопотенциала с учетом статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом.

### Научная новизна

1. Впервые при формировании картины ДРРЛ бинарными сплавами учтен вклад, обусловленный статическими смещениями атомов, путем расчета амплитуд волн статических смещений с применением силовых постоянных межатомного взаимодействия.
2. Развита методика расчета модулирующих функций ближнего порядка с учетом размерного эффекта и определения параметров ближнего порядка в поликристаллических сплавах с ГЦК и ОЦК решетками, а также в сплаве с ГПУ структурой с близкими радиусами координационных сфер, из экспериментально измеренной интенсивности ДРРЛ.
3. Показано, что в рамках кинематической теории рассеяния методом ДРРЛ поликристаллическими сплавами при учете в них статических смещений атомов через значения модулей упругости в приближении упругого континуума достоверно можно определить параметры ближнего порядка на первых четырех-шести координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой и на четырех сферах в сплавах с ОЦК структурой.
4. Разработана методика определения параметров ближнего порядка на первых десяти координационных сферах ГПУ сплава из интенсивности ДРРЛ с различением параметров ближнего порядка на сферах с практически одинаковыми радиусами.
5. Получены новые выражения для динамических матриц для ОЦК, ГЦК и ГПУ структур, выраженные через радиальные и тангенциальные силовые постоянные межатомного взаимодействия. В длинноволновом приближении получены новые выражения для модулей упругости металлов и сплавов с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами, которые позволяют рассчитать их теоретически или оценить из экспериментальных фононных спектров.
6. В рамках самосогласованного метода развита методика расчета критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок в двойных сплавах замещения через спектр значений энергий упорядочения.
7. Реализована методика расчета энергий упорядочения ГЦК сплавов методом модельного потенциала с учетом статических смещений атомов компонент сплава, которая позволяет прогнозировать существование ближнего порядка.
8. Впервые экспериментально доказано существование ближнего порядка в сплавах систем Fe-Re и Fe-Rh. Установлена концентрационная зависимость параметров ближнего порядка на первой координационной сфере в сплавах Fe-3, 5, 7, 9 ат. % Re.

Совокупность развитых в диссертационной работе подходов и полученных через них результатов можно квалифицировать как **научное достижение** в области физики сплавов, связанное с решением проблемы определения типа ближнего упорядочения в бинарных сплавах методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Развитые в работе методы учета вклада статических смещений атомов сплава в ДРРЛ, экспериментального определения параметров ближнего порядка в поликристаллических сплавах, выражения для динамических матриц, методика расчетов энергий упорядочения и оценки критических температур фазового перехода порядок-беспорядок представляют полную систему для изучения ближнего упорядочения двойных сплавов замещения.

**Достоверность** результатов исследований, представленных в диссертационной работе результатов подтверждается использованием общепринятых моделей и соответствием результатов численных расчетов с данными физических экспериментов, а также с результатами теоретических расчетов, полученными в работах других авторов.

**Теоретическая и практическая значимость.** Полученные в диссертационной работе результаты являются основой уточненных теоретических и экспериментальных методов исследования ближнего порядка в сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами и могут применяться как при создании сплавов с особыми физико-химическими свойствами, так и для уточнения фазовых диаграмм двойных сплавов в научно-исследовательских и производственных организациях.

Практически могут быть использованы:

1. Метод определения параметров ближнего порядка в двойных поликристаллических сплавах из интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей.
2. Методика учета вклада статических смещений атомов в интенсивность ДРРЛ двойными поликристаллическими сплавами.
3. Методики расчета динамики кристаллической решетки и модулей упругости металлов и сплавов через значения радиальных и тангенциальных силовых постоянных межатомного взаимодействия.
4. Методика оценки радиальных и тангенциальных силовых постоянных металлов и сплавов из экспериментальных фононных спектров.
5. Методика расчета энергий упорядочения в двойных сплавах замещения через экспериментально определенные параметры ближнего порядка.
6. Метод оценки критических температур фазового перехода порядок-беспорядок в двойных сплавах замещения с применением энергий упорядочения, рассчитанных через экспериментально определенные параметры ближнего порядка.
7. Методика прогноза типа ближнего упорядочения в бинарных сплавах замещения с применением спектра энергий упорядочения, рассчитанных методом псевдопотенциала с учетом статических смещений атомов.

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) имеется возможность достоверного определения параметров ближнего порядка на первых четырех-шести координационных сферах в бинарных поликристаллических сплавах замещения с ГЦК структурой и на четырех сферах в сплавах с ОЦК структурой при учете статических смещений атомов с применением значений модулей упругости матрицы сплава или модулей упругости, рассчитанных методом псевдопотенциала. Таким подходом можно достоверно определить значения параметров ближнего порядка в разбавленных сплавах и ГПУ сплавах с различием близких координационных сфер. Данный метод позволяет проследить зависимость параметров ближнего порядка на первых координационных сферах сплавов Ni-W и Fe-Re от концентрации.
2. Разработанный метод расчета амплитуд волн статических смещений атомов с применением значений силовых постоянных межатомного взаимодействия позволяет достоверно определить параметры ближнего порядка и статические смещения атомов из положений “средней решетки” на первых семи координационных сферах ГЦК сплавов и шести – девяти сферах ОЦК сплавов. Тем самым определить тенденцию типа упорядочения двойного сплава замещения через экспериментальный спектр параметров ближнего порядка.
3. Полученные новые общие выражения элементов динамической матрицы для ОЦК и ГЦК структур с учетом произвольного числа координационных сфер позволяют рассчитать модули упругости  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  металлов и сплавов методом

псевдопотенциала или оценить их из экспериментальных фононных спектров. Для применения динамической матрицы в расчетах амплитуд волн статических смещений атомов компонент сплава, в описании экспериментальных фононных спектров, в оценке значений модулей упругости металлов и сплавов достаточно учесть межатомное взаимодействие на первых трех-девяти координационных сферах.

4. С применением выражений для модулей упругости  $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}$ , полученных из динамической матрицы для ГПУ кристаллов в длинноволновом приближении, имеются возможности оценки радиальных и тангенциальных силовых постоянных межатомного взаимодействия на первых двух координационных сферах через экспериментальные значения модулей упругости.
5. Разработанный с применением статистической теории упорядочения, метод оценки критических температур фазового перехода порядок – беспорядок позволяет уточнить фазовые диаграммы равновесия бинарных сплавов с использованием экспериментальных значений параметров ближнего порядка, определенных методом ДРРЛ. Для оценки критической температуры фазовых переходов порядок-беспорядок достаточно использовать значения энергий упорядочения на первых восьми координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой, четырех – в сплавах с ОЦК структурой.
6. Учет статических смещений атомов в расчетах энергий упорядочения бинарных сплавов методом модельного потенциала позволяет оценить параметры ближнего порядка и повышает их сходимость с экспериментальными результатами. Также дает возможность прогнозирования существования ближнего порядка в бинарных сплавах замещения.

**Апробация результатов.** Основные положения и результаты исследований доложены, обсуждены и одобрены на конференциях и семинарах: Межгосударственный семинар “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий” г.Обнинск 1995, 1997, 2003, 2005, 2011, 2015, 2019 гг.; УИ Совещание по кристаллохимии неорганических соединений, Санкт-Петербург 27-30 июня 1995г.; Конференция “Ломоносовские чтения” МГУ 2003, 2005, 2014 гг.; Международная конференция, посвященная академику Г.В.Курдюмову г.Черноголовка 2014, 2016 гг.; International Conference on Contemporary Physics, Ulan-Bator, Mongolia, June 3-6, 2013; International Scientific Conference “Nano materials and Technologies-VI” Russia, Ulan-Ude, August 22-26, 2016; 8<sup>th</sup> International Symposium on Natural Sciences, Incheon National University, South Korea, 2016; The VII International Conference on Material Science. Erenhot. China. 2018, International Conference on Material Science, Ulan-Bator, Mongolia 2012, 2014, 2017, 2021 гг.; 3-rd Joint Chinese-Mongolian-Russian International Conference on Functional Materials, Hohhot, China 2023; International Conference of X-ray Analysis, Ulan-Bator, Mongolia, 2012, 2014, 2018, 2023 гг.; Научная Конференция Монгольского Физического общества, Улан-Батор, Монголия, 2023, 2024 гг.

Материалы диссертации также представлялись на семинарах кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ в 2015, 2023 гг., на семинаре Факультета естественных наук Уральского федерального университета в 2018 г., на трех семинарах кафедры физики Монгольского государственного университета с 2015 по 2019 гг., на научном семинаре Института Физики и Технологии Монгольской Академии наук в 2024 г.

**Публикации.** По теме диссертации опубликованы 33 статьи, из них 22 - в рецензируемых журналах, зарегистрированных в Web of Science, Scopus, в списках ВАК и РИНЦ России. Также опубликованы 3 препринта, 4 статьи в сборниках и трудах конференций, тезисы к 21 докладу на конференциях.

**Личный вклад автора.** Новые выражения для динамических матриц, модулей упругости, Фурье-образов квазиупругих сил и критических температур фазовых переходов получены лично автором. Автор лично разработал и применил в исследованиях ближнего порядка изученных сплавов метод учета вклада статических смещений в ДРРЛ через силовые постоянные межатомного взаимодействия. Обработка имеющихся в литературе экспериментальных фононых спектров металлов с ОЦК и ГЦК структурой и последующая оценка силовых постоянных проведены лично автором. Подготовка к литью образцов Fe-Re и Fe-Rh, их шлифовка, полировка, термообработка проведены автором. Интенсивности ДРРЛ на образцах Fe-Re, Fe-Rh, Ni-W, Ni-Pt измерены автором на рентгеновском дифрактометре ДРОН-2. Расчеты параметров ближнего порядка в сплавах Fe-Re, Fe-Rh, Ni-W, Ni-Pt, Cu-Au, Ni-Ir, Mg-In из интенсивностей ДРРЛ проведены автором. Теоретические расчеты энергий упорядочения и параметров ближнего порядка методами статической теории упорядочения, а также псевдопотенциальные расчеты, автор непосредственно проводил на языке Фортран.

**Структура и объем диссертации.** Текст диссертации состоит из введения, девяти глав, списка литературы, основных результатов и выводов и четырех приложений. Объем диссертации составляет 263 страницы, включает 42 рисунка и 68 таблиц. Список литературы включает 281 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность работы, формулируются цели и задачи исследования, отмечается научная новизна и практическая значимость работы, приводятся положения, выносимые на защиту, даются сведения об апробации и структуре диссертации.

**Первая глава** содержит обзор литературных данных по теме диссертации. Изложен метод флуктуационных волн, даны определения параметра корреляции и параметра ближнего порядка. Кратко описаны основные уравнения статистической теории ближнего порядка в сплавах замещения, связывающие параметры ближнего порядка и энергии упорядочения. Приведен обзор исследований ближнего порядка в моно- и поликристаллических бинарных сплавах. Из обзора следует, что в исследовании монокристаллических сплавов стремились учесть межатомную корреляцию (ближнее упорядочение) на дальних координационных сферах (иногда на 113 сферах), моделированием методом Монте-Карло прогнозировали возможную сверхструктуру и критическую температуру фазового перехода порядок-беспорядок. Однако в единичных случаях удавалось успешно предсказать тип сверхструктуры и критическую температуру сплава. В основном исследовались монокристаллические сплавы стехиометрического состава со слабым размерным эффектом. В случае исследования поликристаллических сплавов методом ДРРЛ в должном уровне не развита методика учета статических смещений в ДРРЛ, что ограничивает число определяемых параметров ближнего порядка и сужает возможности для оценок

энергий упорядочения и критических температур фазового перехода порядок-беспорядок. В конце главы приведена сводка прогноза существования ближнего порядка в бинарных сплавах замещения, проведенного расчетами энергий упорядочения методом модельного потенциала. Для одной трети сплавов не удается правильно предсказать существование ближнего порядка, что приводит к необходимости учета статических смещений в конфигурационной энергии сплава.

**Во второй главе** описываются теории ДРРЛ, применявшиеся в определении параметров ближнего порядка с учетом статических смещений атомов в поликристаллических и монокристаллических неупорядоченных твердых растворах, их особенности и недостатки. Для наиболее полного учета статических смещений в интенсивности ДРРЛ целесообразно применить метод флуктуационных волн М.А.Кривоглаза [1], согласно которому интенсивность рассеяния поликристаллическим твердым раствором с ГЦК или ОЦК решетками после исключения побочных компонент представляется в виде:

$$I_D(\mathbf{q}_1) = N c_A c_B \sum_i C_i \alpha(R_i) \langle e^{i\mathbf{q}R_i} [\langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_q - (f_A - f_B)]^2 \rangle_{\varphi, \gamma}, \quad (1)$$

где  $N$  – число атомов в элементарной ячейке,  $c_A$  и  $c_B$  – концентрации компонент,  $C_i$  – координационное число для  $i$ -ой координационной сферы,  $\alpha(R_i)$  – параметр ближнего порядка на координационной сфере с радиусом  $R_i$ ,  $\mathbf{q}$  – вектор рассеяния, приведенный к первой зоне Бриллюэна,  $\langle f \rangle$  – средний форм-фактор рассеяния сплава,  $\mathbf{q}_1$  – вектор рассеяния,  $\mathbf{A}_q$  – амплитуда волн статических смещений,  $f_A$  и  $f_B$  – форм-факторы рассеяния компонент сплава,  $\langle \dots \rangle_{\varphi, \gamma}$  – усреднение по всем ориентировкам вектора рассеяния (в сферических координатах по углам  $\varphi, \gamma$ ). Для расчетов амплитуд волн статических смещений  $\mathbf{A}_q$  Кривоглаз М.А. предложил систему трех алгебраических уравнений [1]:

$$D_{qij} A_{qj} = P_{qi}, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (2)$$

где

$$D_{qij} = \sum_{n'=1}^N V_{nn'} e^{i\mathbf{q}(R_n - R_{n'})},$$

$$P_{qi} = -i \sum_{n'=1}^N W_{nn'} e^{i\mathbf{q}(R_n - R_{n'})}.$$

Для решения вышеописанных уравнений необходимы значения констант межатомного взаимодействия  $V_{nn'}$  и  $W_{nn'}$ . Вместо них для ГЦК и ОЦК решеток М.А.Кривоглаз предложил модули упругости  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  и в приближении Борна-Беби [2] выразил элементы динамической матрицы  $D_{qij}$  и компоненты Фурье-образа квазиупругих сил  $P_{qi}$  с учетом нецентрального взаимодействия на первой координационной сфере. Для ГЦК решетки они имеют вид [1]:

$$D_{qxx} = a c_{11} \left[ 2 - \cos \frac{aq_x}{2} \left( \cos \frac{aq_y}{2} + \cos \frac{aq_z}{2} \right) \right] + a (2c_{44} - c_{11}) \left[ 1 - \cos \left( \frac{aq_y}{2} \right) \cos \left( \frac{aq_z}{2} \right) \right];$$

$$D_{qxy} = D_{kyx} = a (c_{12} + c_{44}) \sin \frac{aq_x}{2} \sin \frac{aq_y}{2}; \quad (3)$$

$$P_{qx} = \frac{a^2}{12} (c_{11} + 2c_{12}) \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} \sin \frac{aq_x}{2} \left( \cos \frac{aq_y}{2} + \cos \frac{aq_z}{2} \right).$$

Соответственно для ОЦК решетки:

$$D_{qxx} = 4a c_{44} \left[ 1 - \cos \frac{aq_x}{2} \cos \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2} \right] + a (c_{11} - c_{44}) [1 - \cos(aq_x)];$$

$$D_{qxy} = D_{kyx} = 2a (c_{12} + c_{44}) \sin \frac{aq_x}{2} \sin \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2}; \quad (4)$$

$$P_{qx} = \frac{a^2}{3} (c_{11} + 2c_{12}) \frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} \sin \frac{aq_x}{2} \cos \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2}.$$

Остальные члены динамической матрицы  $D_q$  и компоненты  $P_q$  можно получить посредством циклической перестановки индексов ( $x \rightarrow y \rightarrow z$ ). В выражениях для  $P_q$  параметром статических искажений кристалла является  $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c}$ , где  $v$ -объем элементарной ячейки кристалла.

С применением выражений (1)-(4) в работе [3] разработана методика определения параметров ближнего порядка в сплавах с ГЦК и ОЦК решетками, где интенсивность ДРРЛ была представлена через модулирующие функции ближнего порядка в виде:

$$I_D(q_1) = \Phi_0^{AB}(q_1) - \frac{1}{2} N c_A c_B \sum_i C_i [\alpha(R_i) \Phi_i^{AB}(q_1)], \quad (5)$$

где модулирующие функции ближнего порядка, связанные со статическими смещениями на нулевой и других координационных сферах, имеют вид:

$$\Phi_0^{AB}(q_1) = \langle [(f_A - f_B) + \langle f \rangle (\mathbf{q}_1 \mathbf{A}_q^{AB})]^2 \rangle_{\varphi, \gamma}, \quad (6)$$

$$\Phi_i^{AB}(q_1) = \langle \sum_{R_i} [(f_A - f_B) + \langle f \rangle (\mathbf{q}_1 \mathbf{A}_q^{AB}) \cos(\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_i)]^2 \rangle_{\varphi, \gamma}. \quad (7)$$

Как видно, вышеприведенные модулирующие функции рассчитываются усреднением по всем ориентировкам вектора рассеяния. Суть метода [3] состоит в нахождении параметров ближнего порядка  $\alpha(R_i)$  методом наименьших квадратов из интенсивности ДРРЛ представленного в виде линейной комбинации модулирующих функций  $\Phi_i^{AB}(q_1)$ , которые можно построить с учетом амплитуд волн статических смещений  $\mathbf{A}_q^{AB}$ . С применением методики [3] были определены параметры ближнего порядка на первых трех-четырех координационных сферах сплавов Cu-3ат.%Pt, Fe-2 ат.%W и Mn-21ат.%Ga [4].

В случае ГПУ твердых растворов роль учета статических смещений при определении параметров ближнего порядка из интенсивности ДРРЛ возрастает. В отличие от ГЦК и ОЦК решеток, ГПУ кристаллическая решетка состоит из двух подрешеток. Имеются координационные сферы с близкими радиусами, что обуславливает математическую неустойчивость задачи определения параметров ближнего порядка. Эта трудность преодолевалась в ряде ранних работ с помощью объединения координационных сфер с близкими радиусами. Теория ДРРЛ двойными сплавами с ГПУ решеткой разработана М.А.Кривоглазом и Тю Хао [5], согласно которой выражение для интенсивности ДРРЛ поликристаллическим ГПУ твердым раствором имеет вид:

$$I(q) = N c_A c_B \{ \alpha_0 F_0(q) + \sum_i \alpha_i F_{11}^i(q) + \sum_i \alpha_i F_{12}^i(q) \}, \quad (8)$$

где

$$F_0(q) = \langle B_{q_1} B_{q_1}^* + B_{q_2} B_{q_2}^* \rangle_{\theta, \varphi},$$

$$F_{11}^i(q) = \langle (B_{q_1} B_{q_1}^* + B_{q_2} B_{q_2}^*) e^{i q \rho_{11}^i} \rangle_{\theta, \varphi},$$

$$F_{12}^i(q) = \langle (B_{q_1} B_{q_2}^* e^{i q \rho_{12}^i} + B_{q_2} B_{q_1}^* e^{-i q \rho_{12}^i}) \rangle_{\theta, \varphi}.$$

$$B_{q\gamma} = \langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_{q_1\gamma} e^{i G_n R_1} + \langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_{q_2\gamma} e^{i G_n R_2} - (f_A - f_B),$$

$\rho_{\gamma\gamma'}$  – радиус-вектор, соединяющий узлы подрешеток  $\gamma$  и  $\gamma'$ .

Выражение (8) может использоваться для определения параметров ближнего порядка  $\alpha_i$  в поликристаллических ГПУ неупорядоченных твердых растворах. Для его применения в [5] Кривоглаз М.А и Тю Хао разработали методику расчета амплитуд волн статических смещений  $\mathbf{A}_{q\gamma\gamma'}$ , которые могут быть найдены из системы линейных уравнений (с учетом  $\mathbf{q} = \mathbf{k}$ ):

$$\widehat{D}_{kij}^{11} \mathbf{A}_{kj_1\gamma} + \widehat{D}_{kij}^{12} \mathbf{A}_{kj_2\gamma} = P_{ki}^{1\gamma}, \quad (9)$$

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

Конкретные выражения для динамических матриц  $D_{kij}^{\gamma\gamma'}$  и Фурье-образов квазиупругих сил  $P_{ki}^{\gamma\gamma'}$  были получены в [5] по модели Борна-Бегби.

С применением вышеописанной теории [5] в сплаве Mg-2.9ат.% Tb впервые были определены параметры ближнего порядка без объединения первых двух координационных сфер с практически одинаковыми радиусами [6].

В приведенных выше выражениях (1), (2), (8-9) для расчетов амплитуд волн статических смещений  $A_{k\gamma}$  в модели Борна-Бегби учитывается взаимодействие только между соседними атомами и в них используются значения модулей упругости, которые являются макроскопическими параметрами. Также отмечено в [7], что формулы типа (3) и (4) при больших  $k$  могут давать заметные погрешности. В связи с этими обстоятельствами в [7] вместо модулей упругости рекомендуется использовать силовые постоянные межатомного взаимодействия, которые являются микроскопическими параметрами и дают возможность учета дальнего действия межатомных сил. Значения последних можно оценить теоретически или определить из экспериментальных фононных спектров.

В конце главы описана методика исключения побочных компонент, то есть теплового, комптоновского, двойного брэгговского рассеяний из интенсивности ДРРЛ.

В начале **третьей главы** сделан обзор моделей, описывающих динамику кристаллической решетки, и выражений для элементов динамических матриц и модулей упругости металлов и сплавов с ОЦК, ГЦК и ГПУ решетками через силовые постоянные межатомного взаимодействия.

С целью расчетов амплитуд  $A_q$  волн статических смещений, модулей упругости и оценки радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных межатомного взаимодействия и фононных спектров мы получили в рамках модели Де Лане общие выражения для элементов динамической матрицы ГЦК и ОЦК кристаллов в виде:

$$\begin{aligned} D_{11} &= \frac{1}{6} \sum_n N_n \{ \bar{\beta}_n [6 - C_{h1} C_{k2} C_{l3} - C_{h1} C_{l2} C_{k3} - C_{k1} C_{h2} C_{l3} - C_{k1} C_{l2} C_{h3} - \\ &\quad - C_{l1} C_{h2} C_{k3} - C_{l1} C_{k2} C_{h3}] + \frac{(\bar{\alpha}_n - \bar{\beta}_n)}{h^2 + k^2 + l^2} [h^2 (2 - C_{h1} C_{k2} C_{l3} - C_{h1} C_{l2} C_{k3}) + \\ &\quad + k^2 (2 - C_{k1} C_{h2} C_{l3} - C_{k1} C_{l2} C_{h3}) + l^2 (2 - C_{l1} C_{h2} C_{k3} - C_{l1} C_{k2} C_{h3})] \}; \\ D_{12} &= \frac{1}{6} \sum_n N_n \frac{(\bar{\alpha}_n - \bar{\beta}_n)}{h^2 + k^2 + l^2} \{ hk (S_{h1} S_{k2} C_{l3} + S_{k1} S_{h2} C_{l3}) + hl (S_{h1} S_{l2} C_{k3} + S_{l1} S_{h2} C_{k3}) + \\ &\quad + kl (S_{k1} S_{l2} C_{h3} + S_{l1} S_{k2} C_{h3}) \}; \\ D_{11} &= D_{22} = D_{33}; D_{12} = D_{23} = D_{13}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $N_n$ -число атомов на  $n$ -ой координационной сфере,  $a$ -параметр решетки,  $h, k, l$ -координаты атомов в единицах  $a/2$ ;  $C_{hj} = \cos(haq_j/2)$ ,  $C_{kj} = \cos(kaq_j/2)$ ,  $C_{lj} = \cos(laq_j/2)$ ,  $S_{hj} = \sin(haq_j/2)$ ,  $S_{kj} = \sin(kaq_j/2)$ ,  $S_{lj} = \sin(laq_j/2)$ ,  $j=1,2,3$  ( $q_1=q_x$ ;  $q_2=q_y$ ;  $q_3=q_z$ ).

В длинноволновом приближении  $q \rightarrow 0$  из выражений (13) для элементов динамической матрицы  $D_{ij}$  нами получены выражения модулей упругости  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  ОЦК и ГЦК решеток. Для ОЦК структуры они имеют вид :

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{12a} \sum_n N_n \left\{ \bar{\beta}_n (h^2 + k^2 + l^2) + [\bar{\alpha}_n - \bar{\beta}_n] \frac{h^4 + k^4 + l^4}{h^2 + k^2 + l^2} \right\}; \\ C_{44} &= \frac{1}{12a} \sum_n N_n \left\{ \bar{\beta}_n (h^2 + k^2 + l^2) + [\bar{\alpha}_n - \bar{\beta}_n] \frac{h^2 k^2 + h^2 l^2 + k^2 l^2}{h^2 + k^2 + l^2} \right\}; \\ C_{12} + C_{44} &= \frac{1}{6a} \sum_n N_n [\bar{\alpha}_n - \bar{\beta}_n] \frac{h^2 k^2 + h^2 l^2 + k^2 l^2}{h^2 + k^2 + l^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

В случае ГЦК структуры результаты расчетов  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  нужно умножить на 2.

Достоверность выражений (14) проверялась в расчетах модулей упругости щелочных и некоторых переходных металлов методом псевдопотенциала при

сопоставлении с экспериментальными данными, приведенными в литературе. В рамках теории псевдо-потенциала энергию межатомного взаимодействия в кристалле можно представить в виде [8]:

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin qr}{qr} dq. \quad (15)$$

Здесь  $Z$  – валентность,  $e$  – заряд электрона,  $q$  – модуль волнового вектора,  $r$  – межатомное расстояние,  $G(q)$  – нормированная характеристическая функция :

$$G(q) = \left[ \frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 q^2} \right]^{-2} \frac{W^{bare}(q)^2}{1-f(q)} (1 - 1/\varepsilon(q)), \quad (16)$$

где  $W^{bare}(q)$  - неэкранированный ионный потенциал,  $\Omega$  - атомный объем,

$$\varepsilon(q) = 1 + [1 - f(q)] \frac{4\pi Z e^{*2}}{\Omega_0 q^2} \left( \frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left[ \frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right], \quad (17)$$

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ ,  $k_F$  – импульс Ферми,  $m^*$  – эффективная масса электрона,  $e^{*2} = (1 + \alpha_{eff})e^2$ ,  $f(q)$  – поправка на обмен и корреляцию электронов.

В случае центральных взаимодействий, исходя из межатомного потенциала  $V(r)$ , можно определить два типа силовых постоянных [8]:

$$\bar{\beta} = \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = -\frac{Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^\infty G(q) \left( \cos qr - \frac{\sin qr}{qr} \right) dq, \quad (18)$$

$$\bar{\alpha} = \frac{d^2 V}{dr^2} = -\frac{2Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r} \int_0^\infty G(q) \left( \frac{2 \sin qr}{qr^2} - \frac{2 \cos qr}{r} - q \sin qr \right) dq. \quad (19)$$

В расчетах модулей упругости Li, Na, K, Rb и Cs по вышеприведенным формулам применялся модельный потенциал Ашкрофта. Для Na, K, Rb и Cs результаты расчетов модулей упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  близки к соответствующим результатам [8], полученным в модели Борна-Кармана, и согласуются с экспериментальными данными, которые имеются в литературе. В [9] рассчитаны модули упругости Li с применением модифицированного встроенного аналитического потенциала, значения которых хуже согласуются с экспериментом, чем модули упругости, рассчитанные нами с вариацией параметра  $r_c$  потенциала Ашкрофта до наилучшей сходимости результатов расчета модулей упругости с экспериментальными значениями.

В расчетах модулей упругости ГЦК металлов Ni, Pd, Ag и  $\gamma$ -Fe применялся модельный потенциал переходных металлов Анималу [10]. В Табл. 1 приведены результаты расчетов модулей упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  этих металлов при сопоставлении с результатами других авторов [11,13,14] и экспериментальными данными [12,15]. Для Ni рассчитанные нами значения  $C_{11}$  и  $C_{12}$  лучше сходятся к соответствующим экспериментальным значениям [12], чем результаты расчетов [11], проведенными также в рамках модели Де Лане с применением модельного потенциала Анималу [10]. В случае Pd результаты наших расчетов и расчетов [11] модулей упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  близки к экспериментальным данным [12]. Результаты расчетов  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  для Ag находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом [12]. Модули упругости  $\gamma$ -Fe, рассчитанные нами по формулам (14), представлены в Табл. 1 при сопоставлении со значениями модулей упругости [14], полученными из экспериментального фононного спектра, и с результатами расчетов [13], где исходили из первых принципов в приближении локальной плотности (LDA) в рамках теории функционала плотности и динамической теории усредненного поля. Видно, что наши результаты для  $C_{11}$ ,  $C_{44}$  лучше сходятся с данными [14], чем результаты расчетов [13]. Теоретические значения  $C_{12}$  для  $\gamma$ -Fe близки между собой, но расходятся с соответствующим экспериментальным значением [14]. В расчетах модулей упругости Cu с применением модельного потенциала Анималу не удалось достичь схождения с экспериментом [12],

но с применением потенциала Мориарти нам удалось приблизить рассчитанные значения модулей упругости к экспериментальным данным, что представлено в конце Табл. 1. Для сопоставления там же приведены результаты расчетов [15] модулей упругости Cu, проведенных в приближении локальной плотности (LDA) для обменно-корреляционного потенциала.

В расчетах модулей упругости сплавов силовые постоянные компонент сплавов, рассчитанные с применением модельного потенциала Анималу, усреднялись по концентрации. Рассчитаны модули упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  сплавов  $Cu_{0.75}Zn_{0.25}$ ,  $Ni_{0.804}Cr_{0.196}$ ,  $Ni_{0.502}Fe_{0.498}$ ,  $Ni_{0.738}Fe_{0.262}$ ,  $Ni_{0.892}Fe_{0.108}$ ,  $Fe_{0.76}Cr_{0.12}Ni_{0.12}$ ,  $Fe_{0.705}Cr_{0.175}Ni_{0.120}$  и  $Fe_{0.685}Cr_{0.145}Ni_{0.145}Mo_{0.025}$ , которые удовлетворительно совпадают с экспериментальными данными, имеющимися в литературе.

Табл.1. Результаты расчетов модулей упругости некоторых ГЦК металлов при сопоставлении с экспериментальными данными ( $10^{10}H/M^2$ ) [12].

Металл	Ссылка	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
Ni	Наш результат	23.52	15.08	8.54
	[11] расчет	22.78	17.84	8.70
	Эксп.[12]	24.60	15.00	12.20
Pd	Наш результат	23.48	17.65	6.93
	[11]	24.37	17.57	8.55
	Эксп.[12]	22.70	17.59	7.17
Ag	Наш результат	12.20	9.74	3.85
	Эксп.[12]	12.40	9.37	4.61
$\gamma$ -Fe	Наш результат	15.95	16.49	6.41
	[13] расчет	21.0	16.1	13.8
	Эксп. [14]	15.4	12.2	7.7
Cu	Наш результат	16.68	13.20	9.05
	[15] расчет	15.6	10.6	8.0
	Эксп.[12]	16.84	12.14	7.54

Для расчетов амплитуд  $A_q$  волн статических смещений, модулей упругости и оценки радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных межатомного взаимодействия из экспериментальных значений модулей упругости мы получили в рамках модели Де Лане выражения для элементов динамической матрицы  $D(q)$  гексагональных плотноупакованных (ГПУ) кристаллов с учетом межатомного взаимодействия на первых восьми координационных сферах, которые представлены в виде:

$$D_{xx}^{AA} = -6\beta_1 - (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} - \beta_2 \left\{ 6 - 2\cos(aq_x) - 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right\} -$$

$$-(\alpha_2 - \beta_2) \left\{ 2[1 - \cos(aq_x)] + \left[ 1 - \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right] \right\} - 6\beta_3 - \frac{4a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) -$$

$$\begin{aligned}
& -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 - \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \cos(cq_z) \right] \right\} - \\
& -\beta_8 \{ 6 - 2\cos(2aq_x) - 4\cos(aq_x)\cos(a\sqrt{3}q_y) \} - \\
& -(\alpha_8 - \beta_8) \{ 2[1 - \cos(2aq_x)] + [1 - \cos(aq_x)\cos(a\sqrt{3}q_y)] \}; \\
D_{xx}^{AB} &= \beta_1 \left[ 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-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} + 2e^{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} + \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] \right\} + \\
& + (\alpha_5 - \beta_5) \frac{a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ \left[ \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] + \right. \\
& \left. + 4 \left[ \cos(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right] + 9 \left[ \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] \right\} \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right); \\
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); \\
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); \\
D_{xz}^{AA} &= -(\alpha_7 - \beta_7) \frac{4ac}{a^2+c^2} \left\{ \sin(aq_x) + \sin\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right\} \sin(cq_z); \\
D_{xz}^{AB} &= -(\alpha_1 - \beta_1) \frac{ac}{\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} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& (\alpha_3 - \beta_3) \frac{2ac}{\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \sin(aq_x) e^{i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& -(\alpha_5 - \beta_5) \frac{ac}{\left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left\{ \sin\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} + 2\sin(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} + 3\sin\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right\} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right); \\
D_{yy}^{AA} &= -6\beta_1 - (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} - \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\} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -3(\alpha_2 - \beta_2) \left\{ 1 - \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right\} - 6\beta_3 - \frac{4a^2}{\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\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\} - \\
& -(\alpha_6 - \beta_6) \left\{ \left[ 1 - \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right] + 2 \left[ 1 - \cos(a\sqrt{3}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{6a^2}{a^2 + c^2} \left\{ 1 - \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \cos(cq_z) \right\} - \\
& -\beta_8 \{6 - 2\cos(2aq_x) - 4\cos(aq_x)\cos(a\sqrt{3}q_y)\} - \\
& -(\alpha_8 - \beta_8) \{3[1 - \cos(aq_x)\cos(a\sqrt{3}q_y)]\}; \\
D_{yy}^{AB} &= \beta_1 \left[ 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{3\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left[ 2e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} + \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + \beta_3 \left[ 4\cos(aq_x) e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + \frac{4a^2}{3\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) \left\{ \cos(aq_x) e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right\} \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + 4\beta_5 \left\{ \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} + \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] \right\} + \\
& + (\alpha_5 - \beta_5) \frac{a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ \frac{25}{3} \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} + \frac{16}{3} \cos(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} + \right. \\
& \left. + \frac{1}{3} \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right\} \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right); \\
D_{yz}^{AA} &= -(\alpha_7 - \beta_7) \frac{4ac}{a^2 + c^2} \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \sin\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \sin(cq_z); \\
D_{yz}^{AB} &= -(\alpha_1 - \beta_1) \frac{iac}{\sqrt{3}\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left\{ \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} - e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} \right\} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& - \frac{2iac}{\sqrt{3}\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) \left\{ \cos(aq_x) e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} - e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right\} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& - (\alpha_5 - \beta_5) \frac{iac}{\sqrt{3}\left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left\{ 5\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} - \right. \\
& \left. - 4\cos(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} - \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right\} \sin\left(\frac{cq_z}{2}\right); \\
D_{zz}^{AA} &= -6\beta_1 - (\alpha_1 - \beta_1) \frac{3c^2}{2\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} - \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\} - \\
& - 6\beta_3 - \frac{3c^2}{2\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) - 2\alpha_4 \{1 - \cos(cq_z)\} - 12\beta_5 - (\alpha_5 - \beta_5) \frac{3c^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\} - \\
& - \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{c^2}{a^2 + c^2} \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\} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\beta_8\{6 - 2\cos(2aq_x) - 4\cos(aq_x)\cos(a\sqrt{3}q_y)\}; \\
D_{zz}^{AB} = & \beta_1 \left[ 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + (\alpha_1 - \beta_1) \frac{c^2}{4\left(\frac{a^2+c^2}{3+4}\right)} \left[ 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + \beta_3 \left[ 4\cos(aq_x) e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + \frac{c^2}{4\left(\frac{4a^2+c^2}{3+4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) \left[ 4\cos(aq_x) e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} \right] \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) + \\
& + 4\beta_5 \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) \left[ \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} + \cos(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} + \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right] + \\
& + (\alpha_5 - \beta_5) \frac{c^2}{\frac{7a^2+c^2}{3+4}} \left\{ \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} + \cos(aq_x) e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} + \cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y} \right\} \cos\left(\frac{cq_z}{2}\right); \\
D_{xy}^{AA} = & D_{yx}^{AA}; D_{xz}^{AA} = D_{zx}^{AA}; D_{yz}^{AA} = D_{zy}^{AA}; D_{xy}^{AB} = D_{yx}^{AB}; D_{xz}^{AB} = D_{zx}^{AB}; D_{yz}^{AB} = D_{zy}^{AB}. \quad (20)
\end{aligned}$$

Из вышеприведенных выражений в длинноволновом приближении выведены формулы для модулей упругости металлов и сплавов с ГПУ структурой, имеющие вид:

$$\begin{aligned}
c_{11} = & \frac{1}{2\sqrt{3}c} \left\{ 4\bar{\beta}_1 + \frac{a^2}{\frac{a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1) + 12\bar{\beta}_2 + 9(\bar{\alpha}_2 - \bar{\beta}_2) + 16\bar{\beta}_3 + \frac{16a^2}{\frac{4a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_3 - \bar{\beta}_3) + \right. \\
& + 56\bar{\beta}_5 + \frac{96a^2}{\frac{7a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_5 - \bar{\beta}_5) + 36\bar{\beta}_6 + 27(\bar{\alpha}_6 - \bar{\beta}_6) + 24\bar{\beta}_7 + \frac{18a^2}{c^2+a^2} (\bar{\alpha}_7 - \bar{\beta}_7) + \\
& \left. 48\bar{\beta}_8 + 33(\bar{\alpha}_8 - \bar{\beta}_8) \right\}; \\
c_{44} = & \frac{c}{2\sqrt{3}a^2} \left\{ 6\bar{\beta}_1 + \frac{a^2}{\frac{a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1) + 6\bar{\beta}_3 + \frac{4a^2}{\frac{4a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_3 - \bar{\beta}_3) + 8\bar{\beta}_4 + 12\bar{\beta}_5 + 48\bar{\beta}_7 + \right. \\
& \left. + \frac{24a^2}{c^2+a^2} (\bar{\alpha}_7 - \bar{\beta}_7) \right\}; \\
c_{33} = & \frac{c}{2\sqrt{3}a^2} \left\{ 6\bar{\beta}_1 + \frac{6c^2}{4\left(\frac{a^2+c^2}{3+4}\right)} (\bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1) + 6\bar{\beta}_3 + \frac{6c^2}{4\left(\frac{4a^2+c^2}{3+4}\right)} (\bar{\alpha}_3 - \bar{\beta}_3) + 8\bar{\alpha}_4 + 12\bar{\beta}_5 + \right. \\
& \left. + \frac{3c^2}{\frac{7a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_5 - \bar{\beta}_5) + 48\bar{\beta}_7 + \frac{48a^2}{c^2+a^2} (\bar{\alpha}_7 - \bar{\beta}_7) \right\}; \\
c_{11} - c_{12} = & \frac{1}{c\sqrt{3}} \left\{ 4\bar{\beta}_1 + \frac{a^2}{3\left(\frac{a^2+c^2}{3+4}\right)} (\bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1) + 12\bar{\beta}_2 + 3(\bar{\alpha}_2 - \bar{\beta}_2) + 16\bar{\beta}_3 + \right. \\
& \left. + \frac{16a^2}{3\left(\frac{4a^2+c^2}{3+4}\right)} (\bar{\alpha}_3 - \bar{\beta}_3) \right\} + 56\bar{\beta}_5 + \frac{100a^2}{3\left(\frac{7a^2+c^2}{3+4}\right)} (\bar{\alpha}_5 - \bar{\beta}_5) + 36\bar{\beta}_6 + 9(\bar{\alpha}_6 - \bar{\beta}_6) + 24\bar{\beta}_7 + \\
& + \frac{6a^2}{c^2+a^2} (\bar{\alpha}_7 - \bar{\beta}_7) + 48\bar{\beta}_8 + 12(\bar{\alpha}_8 - \bar{\beta}_8); \\
c_{13} + c_{44} = & \frac{1}{a\sqrt{3}} \left\{ \frac{ac}{\frac{a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_1 - \bar{\beta}_1) + \frac{4ac}{\frac{4a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_3 - \bar{\beta}_3) + \frac{15ac}{\frac{7a^2+c^2}{3+4}} (\bar{\alpha}_5 - \bar{\beta}_5) + \frac{4ac}{c^2+a^2} (\bar{\alpha}_7 - \bar{\beta}_7) \right\}. \quad (21)
\end{aligned}$$

Апробация выражений (21) проводилась нами на примере расчетов модулей упругости и силовых постоянных ГПУ металлов Mg, Ti, Zr и Co. Силовые постоянные межатомного взаимодействия упомянутых металлов рассчитывались двумя разными методами: методом псевдопотенциала и с применением экспериментальных значений

модулей упругости решением системы уравнений (21). В расчетах методом псевдопотенциала применялся модельный потенциал Анималу [10]. В Табл. 2 приведены радиусы первых восьми координационных сфер  $R_n$ , значения радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных для Mg, Ti, Zr и Co, которые рассчитаны методом псевдопотенциала и помечены как теоретические значения. Для сравнения в Табл. 2 приведены силовые постоянные тех же металлов, которые рассчитаны из выражений (21) с применением экспериментальных значений модулей упругости [16]. Они помечены как экспериментальные.

Табл. 2. Значения радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных Mg, Ti, Zr и Co ( $10^{-3}$  Н/м) в зависимости от радиусов координационных сфер  $R_n$  (Å)

Номер сферы $n$		1	2	3	4	5	6	7	8
Mg	$R_n$	3.197	3.210	4.530	5.210	5.552	5.560	6.119	6.420
	$\bar{\alpha}_n$ –теор.	15431.3	14641.2	-1539.7	310.4	276.8	272.4	-165.5	-253.7
	$\bar{\alpha}_n$ –эксп.	18095.3	17295.1	-2801.6					
	$\bar{\beta}_n$ –теор.	-20.8	40.2	56.3	-1.1	19.0	19.4	21.8	10.2
	$\bar{\beta}_n$ –эксп.	-57.1	-469.8						
Ti	$R_n$	2.894	2.951	4.133	4.679	5.079	5.111	5.532	5.902
	$\bar{\alpha}_n$ –теор.	28580.6	25579.9	-2361.1	-2335.8	1401.5	1589.4	1178.9	-797.3
	$\bar{\alpha}_n$ –эксп.	29564.1	24891.8	2447.6					
	$\bar{\beta}_n$ –теор.	-4875.4	-4253.7	381.3	-75.9	-94.2	-84.0	54.9	61.5
	$\bar{\beta}_n$ –эксп.	-1243.7	-3410.3						
Zr	$R_n$	3.176	3.223	4.525	5.147	5.555	5.582	6.073	6.446
	$\bar{\alpha}_n$ –теор.	32315.9	23299.6	2243.1	-8404.1	-1335.2	-777.6	4190.7	887.9
	$\bar{\alpha}_n$ –эксп.	30044.4	25444.8	484.2					
	$\bar{\beta}_n$ –теор.	-2117.4	-1681.2	919.6	154.5	-248.0	-251.9	-14.9	150.6
	$\bar{\beta}_n$ –эксп.	-1922.6	-473.5						
Co	$R_n$	2.497	2.507	3.538	4.070	4.337	4.342	4.780	5.014
	$\bar{\alpha}_n$ –теор.	40172.0	38652.0	218.1	652.9	-4.2	-19.6	-720.8	-602.3
	$\bar{\alpha}_n$ –эксп.	45686.0	42894.3	417.4					
	$\bar{\beta}_n$ –теор.	-3233.5	3063.0	-16.1	76.1	-4.2	92.3	41.3	7.2
	$\bar{\beta}_n$ –эксп.	-1783.5	-4750.7						

Из данных Табл. 2 можно заключить, что значения радиальных силовых постоянных  $\bar{\alpha}_1$  и  $\bar{\alpha}_2$  на первых двух координационных сферах Mg, Ti, Zr и Co, рассчитанные методом псевдопотенциала, хорошо согласуются со значениями, полученными с применением значений модулей упругости. Для всех элементов значения силовой постоянной  $\beta_1$  на первой сфере, рассчитанные методом псевдопотенциала, по знаку согласуются со значениями, полученными с применением значений модулей упругости. Для радиальной силовой постоянной на третьей координационной сфере  $\bar{\alpha}_3$  не можем констатировать удовлетворительное согласие значений, рассчитанных методом псевдопотенциала, со значениями, полученными с применением значений модулей упругости, что видно из данных Табл. 2. Это обстоятельство можно объяснить тем, что из экспериментальных значений  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,

$C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$  модулей упругости с применением выражений (20) можно получить только пять неизвестных параметров на первых трех координационных сферах.

Для верификации значений силовых постоянных, рассчитанных методом псевдопотенциала, мы рассчитали по ним модули упругости Mg, Ti, Zr и Co с применением выражений (21). Результаты расчетов модулей упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$  в целом находятся в удовлетворительном согласии с соответствующими экспериментальными данными, которые имеются в литературе [16].

В конце главы выражения (13) и (20) для элементов динамической матрицы  $D(\mathbf{q})$  применены в оценке радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных в Cs,  $\alpha$ -Fe,  $\gamma$ -Fe, Ni и Y из экспериментально измеренных другими авторами фоновых спектров. Выражения (20) и (21) для ГПУ структур апробированы расчетами фоновых спектров и упругих постоянных магния. С использованием метода наименьших квадратов, путем описания экспериментальных дисперсий фононов вдоль направлений симметрии определены значения радиальных  $\bar{\alpha}_n$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_n$  силовых постоянных Cs,  $\alpha$ -Fe,  $\gamma$ -Fe, Ni и Y на первых трех-шести координационных сферах, проведена оценка модулей упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , значения которых удовлетворительно совпадают с экспериментальными значениями, имеющимися в литературе. Рассчитанные с применением полученных силовых постоянных дисперсии фононов удовлетворительно описывают экспериментальные значения нормальных частот. Например, на Рис. 1 показана рассчитанная с применением силовых постоянных на первых четырех координационных сферах дисперсия фононов  $\gamma$ -Fe при сопоставлении с экспериментальной зависимостью [14].

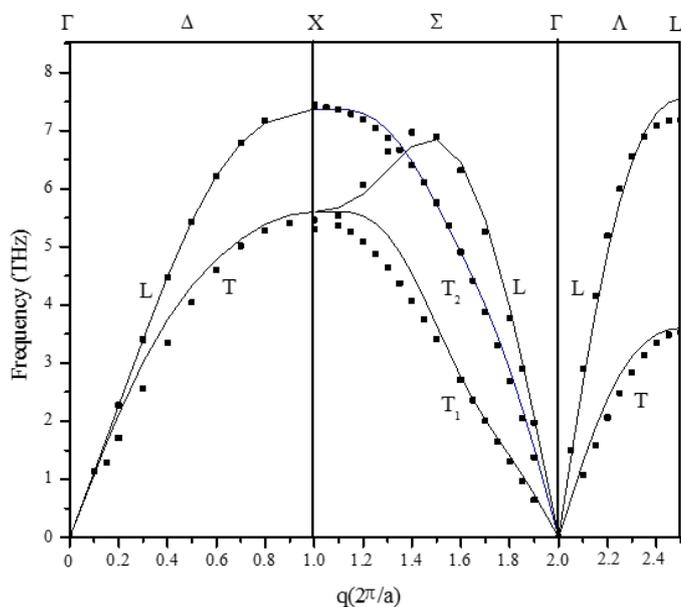


Рис. 1. Фоновый спектр  $\gamma$ -Fe при температуре 1428 К. Экспериментальные значения частот [14] показаны квадратиками, а сплошные кривые соответствуют рассчитанным нами фоновым ветвям с учетом радиальных и тангенциальных силовых постоянных на первых четырех координационных сферах.

В четвертой главе приведены результаты исследования ближнего порядка в сплавах на основе никеля методом ДРРЛ с применением методики [3], то есть с учетом статических смещений через значения модулей упругости матрицы сплава или рассчитанных методом псевдопотенциала. Изучены сплавы Ni-1.6, 6.0, 13.1 ат.% W, Ni-14 ат.% Ir и Ni-14 ат.% Pt.

В разбавленном сплаве Ni-1.6 ат.% W определены параметры ближнего порядка на первых четырех координационных сферах равные  $\alpha_1 = -0.004$ ,  $\alpha_2 = -0.0031$ ,  $\alpha_3 = -0.006$ ,  $\alpha_4 = 0.05$  и сделан вывод, что в данном сплаве реализуется слабый ближний порядок, характерный для ближнего порядка по типу одиночной примеси. Методом псевдопотенциала рассчитано значение энергии упорядочения в сплаве Ni-1.6 ат.% W с учетом статических смещений атомов на первой координационной сфере и сделан вывод, что учет статических смещений меняет энергию упорядочения в разумном направлении.

Для сплава Ni-6.0 ат.% W из интенсивности ДРПЛ уточнено значение дебаевской температуры  $T_D = 460\text{K}$ , оценен параметр статических искажений  $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} = 0.15$ , определены значения параметров ближнего порядка для первых четырех координационных сферах, которые равны  $\alpha_1 = -0.051$ ,  $\alpha_2 = 0.031$ ,  $\alpha_3 = -0.008$ ,  $\alpha_4 = 0.041$ .

Интенсивность ДРПЛ сплавом Ni-13.1 ат.% W зависимости от угла рассеяния  $2\theta$  показан на Рис. 2, откуда видно, что в первом интервале углов от 12 до 48 градусов по  $2\theta$  выявлен отчетливый максимум, присущий ближнему порядку в расположении атомов. На следующем интервале также присутствует максимум, но с меньшим значением.

Параметр искажений  $\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial c} = 0.14$  в сплаве Ni-13.1 ат.% W определялся из измеренной рентгеновским методом зависимости параметра решетки твердого раствора Ni-W от концентрации вольфрама и использовался при расчетах по формулам (6)- (7) модулирующих функций  $\Phi_j^{AB}(q)$  ближнего порядка, согласно методике [3].

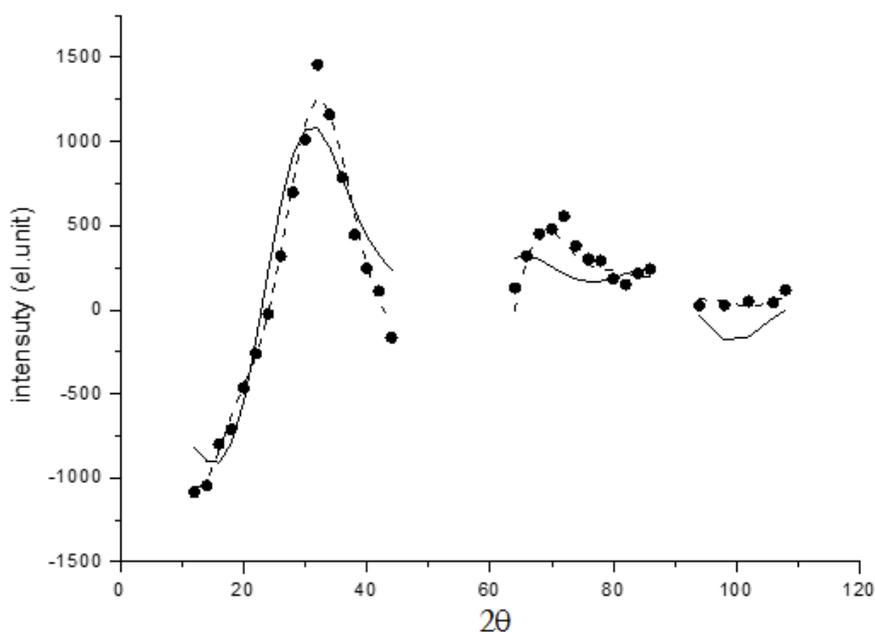


Рис.2. Интенсивность ДРПЛ сплавом Ni-13.1 ат.% W: ● - экспериментальные значения [113]; --- - синтез с использованием параметров ближнего порядка на первых десяти координационных сферах; — - синтез с использованием параметров ближнего порядка на первых пяти координационных сферах.

В Табл. 3 приведен спектр параметров ближнего порядка  $\alpha_j$  твердого раствора Ni-13.1 ат.% W на первых десяти координационных сферах, рассчитанный нами методом наименьших квадратов с коэффициентом детерминации  $R^2 = 0.97$ . Для выявления тенденции типа дальнего упорядочения сплава в последнем столбце Табл.3 приведен спектр параметров ближнего порядка сверхструктуры Ni<sub>4</sub>W на первых одиннадцати координационных сферах при сопоставлении с экспериментальными значениями параметров ближнего порядка твердого раствора Ni-13.1 ат.% W. Видно, что знаки параметров ближнего порядка изучаемого твердого раствора на первых пяти

координационных сферах совпадают со знаками параметров ближнего порядка сверхструктуры Ni<sub>4</sub>W. Поэтому нами сделан вывод, что в твердом растворе Ni-13.1ат.%W устанавливается дальнейшее упорядочение по типу сверхструктуры Ni<sub>4</sub>W.

Табл. 3. Значения параметров ближнего порядка и их  $t$ -критериев для твердого раствора Ni-13.1ат.%W

Номер сферы $j$	$\alpha_j$	$t$ -критерий	$\alpha_j$	$t$ -критерий	Ni <sub>4</sub> W
1	-0.13	-13.9	-0.14	-9.8	-1/4
2	0.24	7.8	0.28	5.9	1/6
3	0.03	2.5	0.02	0.9	1/6
4	-0.01	-0.1	-0.07	-1.8	-1/4
5	-0.09	-5.6	0.00	0.3	-1/24
6	0.12	2.9	-	-	-1/4
7	0.02	0.3	-	-	1/6
8	0.26	2.9	-	-	1/6
9	-0.06	-2.5	-	-	-1/4
10			-	-	-1/24
11	0.02	0.8			-1/4

Синтезированная кривая интенсивности ДРРЛ, рассчитанная с использованием полученных значений  $\alpha_j$  на первых десяти координационных сферах, показана на Рис. 2 в виде пунктирной линии. Видно, что синтезированная кривая хорошо описывает экспериментальную зависимость. Для выявления достоверности полученных значений параметров ближнего порядка твердого раствора Ni-13.1ат.%W был проведен статистический факторный анализ. В третьем столбце Табл. 3 приведены значения  $t$ -критерия для оценки значимости полученных значений параметров ближнего порядка на первых десяти координационных сферах. Видно, что все параметры ближнего порядка кроме параметров на четвертой, седьмой и десятой сферах значимы для данной модели расчета. С целью выяснения устойчивости полученных решений были рассчитаны парные коэффициенты корреляции между модулирующими функциями  $\Phi_j^{AB}(q)$  ближнего порядка для учитываемых координационных сфер. Оказалось, что модулирующие функции на соседних координационных сферах, начиная с пятой сферы до десятой сферы, попарно коррелируют друг с другом с парным коэффициентом корреляции  $r$ , превышающим значение 0.85, что приводит к уменьшению значимости и неустойчивости решений системы линейных уравнений с использованием метода наименьших квадратов. На рис. 4.6 графики зависимости модулирующих функций  $\Phi_j^{AB}(q)$  для пятой-десятой координационных сфер. Заметно, что эти функции близки по форме.

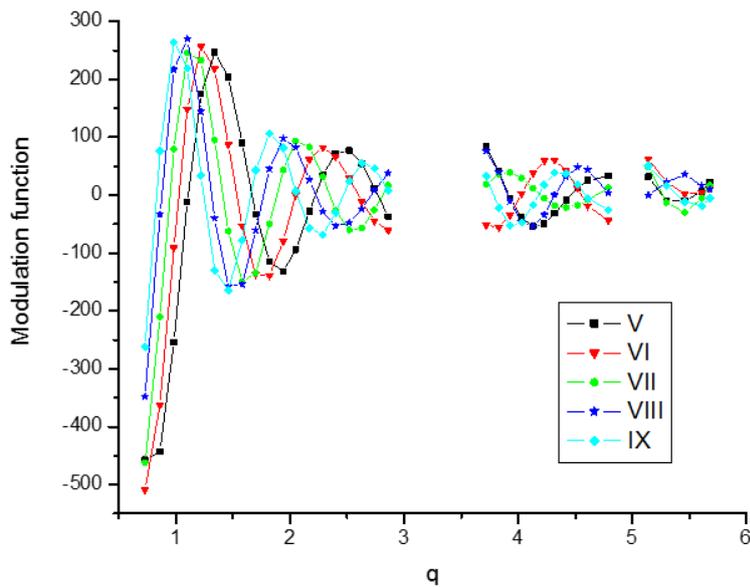


Рис. 3. Модулирующие функции  $\Phi_i^{AB}(q)$  сплава Ni-13.1 ат.%W для пятой-десятой координационных сфер, рассчитанные по модели Борна-Бегби с применением модулей упругости матрицы сплава.

Из полученных значений  $t$ -критерия и парных коэффициентов корреляции можно заключить, что по данной методике расчета значимыми могут быть значения параметров ближнего порядка только на первых пяти координационных сферах. Этот вывод находится в согласии с результатом [17], где были определены из интенсивности ДРРЛ параметры ближнего порядка на первых восьми сферах неупорядоченного раствора Cu-25ат.% Au с применением функции парного распределения, но значимыми оказались параметры ближнего порядка на первых пяти координационных сферах, а на остальных сферах параметры ближнего порядка соответствуют беспорядочному распределению атомов. Поэтому нами были рассчитаны значения параметров ближнего порядка и их  $t$ -критериев на первых пяти координационных сферах, что представлены в пятой и шестой столбцах Табл. 3. Коэффициент детерминации при этом уменьшился и стал  $R^2=0.88$ , что связано с уменьшением количества модулирующих функций. Значение  $t$ -критерия для параметра ближнего порядка на пятой сфере равно 0.300 значительно меньше 1.697, что свидетельствует о малой значимости этого параметра. Табличное значение  $t$ -критерия 1.697 выбиралось при степени свободы  $k=30$  и значимости 0.10. Нужно отметить, что при ограничении количества координационных сфер до пяти  $t$ -критерий параметра ближнего на четвертой координационной сфере вырос на порядок, что свидетельствует о возросшей значимости этого параметра. Параметр ближнего порядка на пятой сфере равен нулю. Следовательно, для системы Ni-W по данной модели расчета параметров ближнего порядка значимыми будут значения параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах. На Рис. 4 показаны графики модулирующих функций сплава Ni-13.1ат.%W на первых пяти координационных сферах, для которых заметны относительные сдвиги, что указывает на слабую парную корреляцию этих функций.

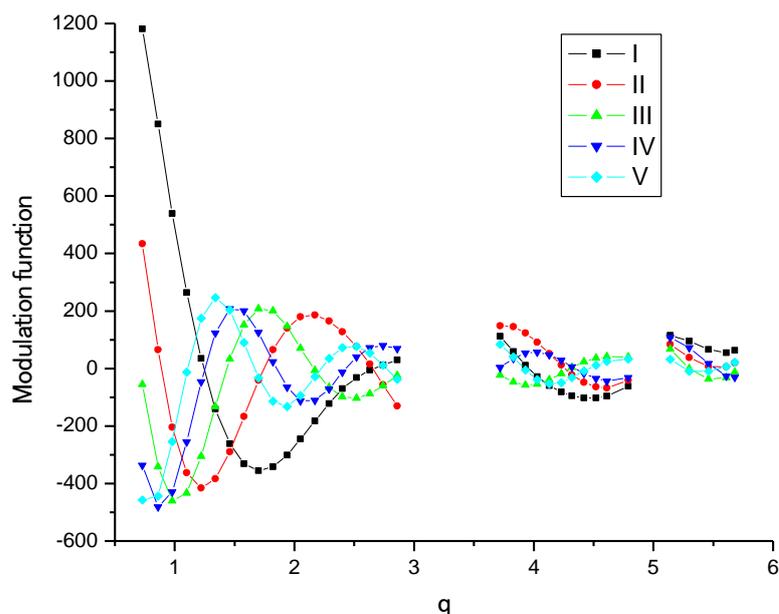


Рис. 4. Модулирующие функции  $\Phi_i^{AB}(q)$  сплава Ni-13.1 ат.%W на первых пяти координационных сферах.

Кривая интенсивности ДРПЛ сплавом Ni-13.1 ат.%W, синтезированная с использованием рассчитанных значений ближнего порядка на первых пяти координационных сферах приведена на Рис. 2. Видно, что в первом интервале углов синтезированные значения удовлетворительно описывает эксперимент, в середине второго интервала кривая синтеза проходит ниже экспериментальных точек, а в третьем интервале кривая синтеза расположена ниже экспериментальных точек, что может указывать на неполный учет статических смещений атомов компонент изучаемого сплава.

Из результатов изучения ближнего порядка в сплавах Ni-1.6, 6.0, 13.1 ат.%W установлена концентрационная зависимость параметра ближнего порядка  $\alpha_1$  на первой сфере, которая показана на Рис. 5.

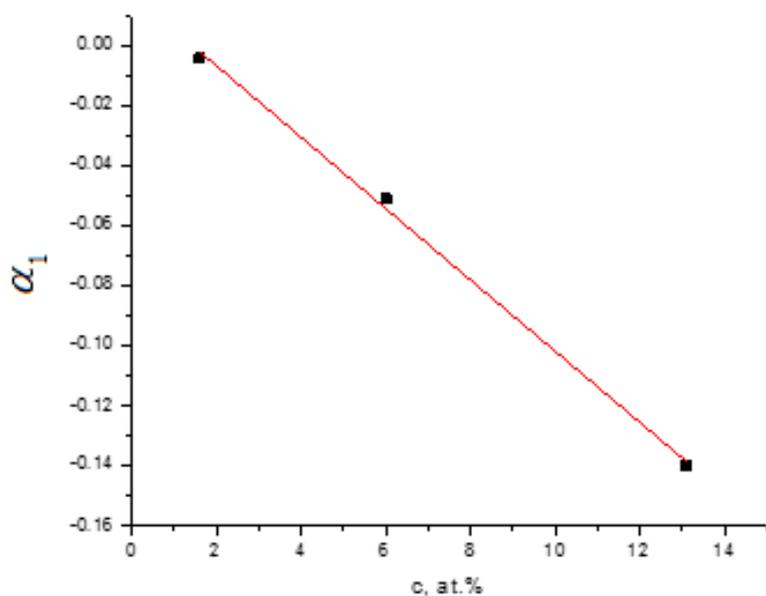


Рис. 5. Концентрационная зависимость параметра ближнего порядка на первой сфере сплавов Ni-W.

Далее в главе приведены результаты исследования ближнего порядка в сплаве Ni-14 ат.% Ig методом ДРПЛ с применением методики [3] в рамках модели Борна-Бегби. Были определены параметры ближнего порядка на первых пяти координационных

сферах, которые представлены в Табл. 4. Для сравнения в последнем столбце Табл. 4 приведены параметры ближнего порядка сверхструктуры  $L1_2$ , которая реализуется в соединении  $Ni_3Ir$  согласно фазовой диаграмме системы Ni-Ir. Согласие по знаку параметров ближнего порядка  $\alpha_{1-5}$  на первых пяти сферах с соответствующими значениям сверхструктуры  $L1_2$  указывает на тенденцию сплава Ni-14 ат.% Ir к упорядочению по данному типу.

Расчеты энергий упорядочения сплава Ni-14 ат.% Ir проводились в приближении Кривоглаза-Клэппа-Мосса [18] с применением экспериментальных значений параметров ближнего порядка. Рассчитанные значения энергий упорядочения  $W_j$  на первых пяти координационных сферах сплава Ni-14 ат.% Ir приведены в Табл. 4. Видно, что знакопереживание спектра значений  $W_j$  находятся в согласии со знакопереживанием параметров ближнего порядка  $\alpha_j^{\text{эксп}}$ .

Табл.4. Параметры ближнего порядка и значения энергии упорядочения сплава Ni-14 ат.% Ir, параметры ближнего порядка сверхструктуры  $Ni_3Ir$

$j$	$\alpha_j^{\text{эксп}}$	$W_j$ , мэВ	$\alpha_j$ в $L1_2$
1	-0.039	14.7	-0.333
2	0.092	-39.0	1
3	-0.018	7.5	-0.333
4	0.052	-20.5	1
5	-0.026	12.8	-0.333

В конце главы приведены результаты исследования ближнего порядка в сплаве Ni-14 ат.% Pt методом ДРПЛ. При учете статических смещений в сплаве применялись модули упругости Ni и Pt, усредненные по концентрации сплава. В Табл. 5 представлены значения параметров ближнего порядка  $\alpha_j^{\text{эксп}}$  на первых шести координационных сферах сплава Ni-14 ат.% Pt. Чередуемость знаков  $\alpha_j^{\text{эксп}}$  совпадает с чередуемостью знаков параметров ближнего порядка для сверхструктуры  $L1_2$  (см. последний столбец Табл. 5). Подобное совпадение знаков параметров ближнего порядка указывает на существование в сплаве Ni-14 ат. % Pt ближнего упорядочения по типу сверхструктуры  $L1_2$ . С использованием экспериментальных значений параметров ближнего порядка, приведенным в Табл. 5, в приближении Кривоглаза-Клэппа-Мосса [18] рассчитывались значения энергий упорядочения  $W_j$ , которые представлены в Табл. 5. С применением найденных значений энергий упорядочения проводилась оценка энергии ближнего порядка сплава Ni-14 ат. % Pt, которая имеет отрицательный знак и равна -32.2 мэВ. Это свидетельствует о том, что ближний порядок вносит заметный стабилизирующий вклад в энергию кристаллической структуры сплава Ni-14 ат.% Pt.

По найденным значениям энергий упорядочения оценена температура фазового перехода порядок-беспорядок  $T_c$  с использованием выражения:

$$T_c = -\frac{2c_A c_B}{k_B} (-4W_1 + 6W_2 - 8W_3 + 12W_4 - 8W_5). \quad (22)$$

Для сплавов нестехиометрических составов критическая температура фазового перехода беспорядок-порядок соответствует температуре распада неупорядоченного твердого раствора на сверхструктуру со стехиометрическим составом и на чистый элемент. С применением значений энергий упорядочения и формулы (22) для

твердого раствора Ni-14 ат. % Pt рассчитана критическая температура распада на сверхструктуру Ni<sub>3</sub>Pt и на чистый никель, которая равна 35°C и не противоречит данным из диаграммы состояния системы Ni-Pt.

Табл. 5. Экспериментальные значения параметров ближнего порядка, энергии упорядочения для сплава Ni-14 ат. %Pt , параметры ближнего порядка для сверхструктуры L<sub>2</sub>

Номер сферы $j$	Координаты атомов $lmn$	$\alpha_j^{\text{эксп}}$	$W_j$ , мэВ	$\alpha_j$ в L <sub>2</sub>
1	110	-0.044	51.6	-0.333
2	200	0.166	-142.4	1
3	211	0.000	-28.1	-0.333
4	220	0.013	11.3	1
5	310	-0.013	-103.5	-0.333
6	222	0.120	-9.5	1

В пятой главе представлены результаты исследований ближнего порядка в сплавах Fe-3, 5, 7 ат.%Re и Fe-2.5, 25.0 ат.%Rh методом ДРПЛ с учетом статических смещений атомов методом флуктуационных волн. При этом модули упругости сплавов Fe-3, 5 и 7 ат.%Re, рассчитывались методом псевдопотенциала с применением модельного потенциала Анималу. Значения параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах сплавов Fe - 3, 5 и 7 ат.%Re приведены в Табл. 6.

Табл. 6. Значения радиусов координационных сфер, параметров ближнего порядка и энергий упорядочения сплавов Fe-Re.

Номер коорд. сферы	Fe-3ат.%Re			Fe-5ат. %Re			Fe-7ат.%Re		
	$r$ , Å	$\alpha_i$	$W$ , кВ	$r$ , Å	$\alpha_i$	$W$ , кВ	$r$ , Å	$\alpha_i$	$W$ , кВ
1	2.491	-0.014	228.4	2.495	-0.022	208.6	2.499	-0.039	264.9
2	2.877	0.025	-261.5	2.881	0.028	-187.0	2.886	0.044	-185.1
3	4.068	-0.007	120.6	4.074	-0.005	54.1	4.081	0.000	29.6
4	4.770	0.006	-70.0	4.778	0.008	-62.3	4.785	0.003	-30.6

Из данных Табл. 6 видно, что для всех трех сплавов значения параметров ближнего порядка на первой координационной сфере отрицательны по знаку, что свидетельствует о существовании ближнего порядка в твердых растворах железо - рений. С ростом содержания рения от 3 до 7 ат.%Re наблюдается рост значений параметра  $|\alpha_1|$  более чем в два раза. При этом значения параметра  $\alpha_2$  также растут. Видно также, что для сплавов содержащих 3 и 5 ат. %Re значения параметра  $\alpha_3$  отрицательны, а для сплава 7 ат.%Re этот параметр меняет знак. Для всех сплавов значения  $\alpha_4$  положительны. Данные в Табл. 6 значения параметров ближнего порядка указывают на сильную концентрационную зависимости параметров ближнего порядка в твердых растворах железо - рений.

В Табл. 6 показаны значения энергий упорядочения  $W_j$  ( $j=1,2,3,4$ ) на первых четырех координационных сферах сплавов Fe - 3, 5 и 7 ат.%Re, рассчитанные нами по самосогласованной системе уравнений Каули [18]. Из данных таблицы можно заключить, что для всех сплавов значения энергий упорядочения с чередованием меняют знак с увеличением номера координационной сферы. С использованием значений энергии упорядочения и параметров ближнего порядка мы рассчитали энергию ближнего порядка для каждого сплава Fe 3,5,7 ат.%Re, которые соответственно равны  $-85.4k_B$ ,  $-77.3k_B$  и  $-133.7k_B$ . Отсюда сделан вывод, что в сплаве Fe-7ат.%Re ближнее упорядочение играет наибольшую стабилизирующую роль. С целью подтверждения этого факта для сплавов Fe-3,5,7 ат.%Re мы рассчитали гипотетические значения критических температур фазового перехода порядок-беспорядок. Известно, что в ОЦК сплавах могут реализоваться сверхструктуры B2, DO<sub>3</sub>, B32. Для сверхструктуры B2 из уравнений Каули [18] мы вывели выражение для критической температуры в виде:

$$T_c = -\frac{2c_{ACB}}{k_B} [-8W_1 + 6W_2 + 12W_3 - 24W_4]. \quad (23)$$

Для сверхструктуры DO<sub>3</sub> выражение для критической температуры имеет вид:

$$T_c = -\frac{2c_{ACB}}{k_B} \left[ -\frac{8}{3}W_1 + 6W_2 - 4W_3 - 8W_4 \right]. \quad (24)$$

Выражение критической температуры для сверхструктуры B32 имеет вид:

$$T_c = -\frac{2c_{ACB}}{k_B} [-6W_2 + 12W_3]. \quad (25)$$

По вышеприведенным выражениям (23) - (25) с применением значений энергий упорядочения, представленных в Табл. 6, нами рассчитаны гипотетические значения критических температур фазового перехода порядок-беспорядок в сплавах Fe 3,5,7 ат.%Re, которые показаны в Табл. 7. Из данных Табл. 7 видно, что для сверхструктур B32 и DO<sub>3</sub> значение гипотетической температуры в сплавах Fe-3,5,7 ат.%Re растет с ростом концентрации рения. Для всех рассмотренных структур значение гипотетической температуры ниже комнатной, что объясняется слабым ближним порядком в сплавах Fe-3,5,7 ат.%Re и согласуется с диаграммой состояния системы Fe-Re. Наибольшая гипотетическая критическая температура рассчитана для сплава Fe-7 ат.%Re, что согласуется с вышеприведенными результатами расчета энергии ближнего порядка.

Табл. 7. Значения гипотетической критической температуры сплавов Fe-Re для трех типов сверхструктур

Сплав	Тип сверхструктуры		
	B2	DO <sub>3</sub>	B32
Fe-3ат.%Re	11.5K	120.0K	175.5K
Fe-5ат.%Re	61.4K	132.6K	168.3K
Fe-7ат.%Re	278.9K	220.1K	194.8K

Параметры ближнего порядка в сплаве Fe-2.5 ат.%Rh определялись нами методом ДРПЛ с учетом статических смещений через значения модулей упругости сплава, которые рассчитывались с применением модельного потенциала Анималу. Значения параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах сплава Fe-2.5ат.%Rh соответственно равны  $\alpha_1 = -0.022$ ;  $\alpha_2 = -0.009$ ;  $\alpha_3 = 0.020$ ;  $\alpha_4 = 0.05$  при температуре Дебая 440K и параметре статических искажений  $\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial c} = 0.15$ . На первой координационной сфере  $\alpha_1$  имеет отрицательный знак, что свидетельствует о

существовании ближнего порядка в сплаве Fe-2.5ат %Rh. По величине параметр  $\alpha_1$  оказался близким к максимально возможному для данного состава  $\left(-\frac{c_{Rh}}{c_{Fe}}\right)$ . Отметим, что параметр ближнего порядка на второй сфере -отрицательный.

На дифрактограмме сплава Fe-25ат.%Rh, измеренном после отжига при 900°C в течение 1ч с последующей закалкой в воде, присутствовали пики интенсивности, соответствующие рефлексам  $\alpha'$  и  $\gamma$  -фаз. В области углов  $2\theta = 20\div 50^\circ$  существует широкий диффузный максимум, на гребне которого находится пик интенсивности, соответствующей линии (100)  $\alpha'$ - фазы. Этот факт указывает на то, что в сплаве Fe-25ат.%Rh наряду с областями  $\alpha'$ - фазы существуют области  $\gamma$  твердого раствора со значительным ближним порядком в расположении атомов компонент. Двухфазность образца сплава Fe-25ат.%Rh не позволила обработать интенсивность ДРПЛ этим сплавом на предмет определения параметров ближнего порядка. Поэтому с целью теоретического определения существования ближнего порядка в сплавах Fe-Rh были проведены расчеты энергии упорядочения с применением модельного потенциала Анималу [10]. С учетом теории возмущения до второго порядка были рассчитаны значения энергий упорядочения на первых трех координационных сферах  $W(R_i)$  сплавов Fe-2.5 и 25 ат.%Rh, приведенные в Табл. 8. Видно, что значения на первой координационной сфере  $W(R_1)$  имеют положительный знак, что позволяет предположить существование ближнего порядка в сплавах Fe-2.5 и 25 ат.%Rh.

Таблица 8. Теоретические значения энергий упорядочения ( $10^{-3}$  а.е. ) и параметров ближнего порядка

Сплавы	№ координационной сферы $j$	$W(R_j)$	$\alpha_j$
Fe-2.5 ат.%Rh	1	4.1	-0.02
	2	4.4	-0.02
	3	-1.0	0.01
Fe-25 ат.%Rh	1	3.1	-0.19
	2	-0.8	0.50
	3	0.6	-0.16

С использованием полученных значений энергий упорядочения по формулам Каули [18] были рассчитаны значения параметров ближнего порядка на первых трех координационных сферах сплавов Fe-2.5, 25 ат.%Rh. Результаты расчетов приведены в последнем столбце Табл. 8. Сопоставляя рассчитанные методом модельного потенциала значения параметров ближнего порядка для ОЦК сплава Fe-2.5 ат.%Rh с экспериментальными значениями, видим, что для первых трех координационных сфер наблюдается согласие по знаку.

В **шестой главе** нами определены параметры ближнего порядка в сплавах Au - 10, 17, 25 ат.% Cu и Cu -25 ат.%Au из интенсивности ДРПЛ, измеренной ранее другими авторами [19]. Интенсивность ДРПЛ сплавами Au - 10, 17, 25 ат.% Cu показана на Рис. 6. Видно, что для всех трех твердых растворов в области существования возможных сверхструктурных рефлексов (100)-(110), (210)-(211) обнаружено модулированное диффузное рассеяние, характерное скорее для сплавов с ближним расслоением. Интерпретация этих кривых неоднозначна и в [19] не проводилась.

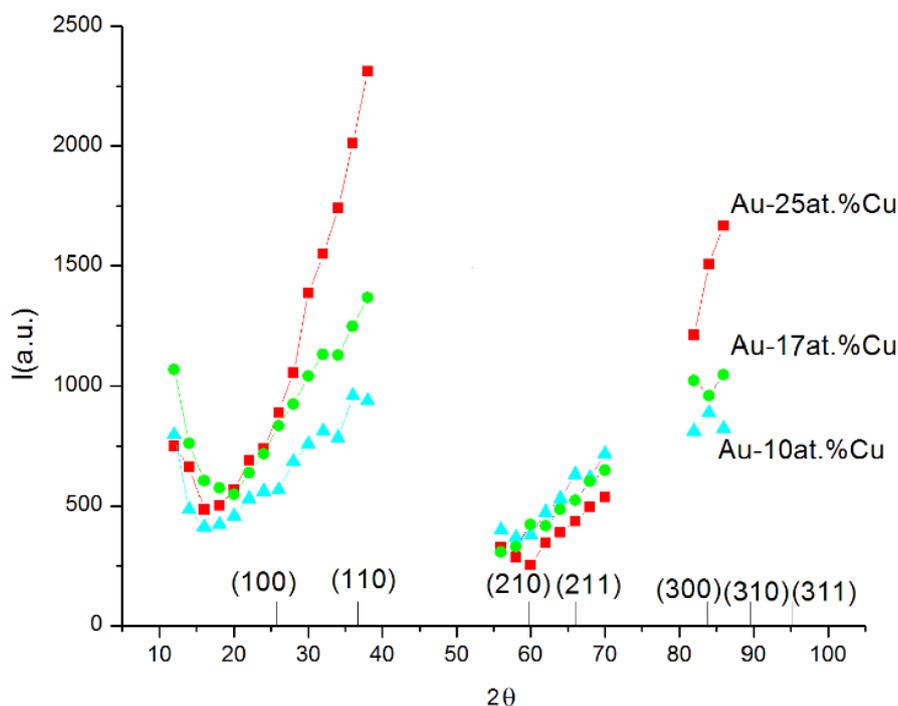


Рис. 6. Значения интенсивности ДРРЛ неупорядоченными поликристаллическими твердыми растворами на основе золота, содержащими 10, 17 и 25 ат.% меди [19]. Вертикальными линиями обозначены положения возможных сверхструктурных рефлексов упорядоченной фазы  $\text{CuAu}_3$ .

В Табл. 9 показаны параметры ближнего порядка Au-10, 17, 25ат.%Cu, определенные из интенсивности ДРРЛ при учете статических смещений с применением модулей упругости матрицы сплава. Абсолютные значения параметров ближнего порядка на первых шести сферах растут с ростом содержания Cu в сплавах. В последнем столбце таблицы даны значения параметров ближнего порядка для сверхструктуры  $\text{CuAu}_3$  [18].

Табл.9. Значения параметров ближнего порядка в неупорядоченных твердых растворах Au-10, 17, 25ат.%Cu

Параметры ближн. порядка	Au-10 ат.%Cu	Au-17 ат.%Cu	Au-25 ат.%Cu	$\text{CuAu}_3$
$\alpha_1$	-0.04	-0.06	-0.12	-1/3
$\alpha_2$	0.26	0.34	0.60	1
$\alpha_3$	-0.02	-0.04	-0.12	-1/3
$\alpha_4$	0.00	-0.01	0.14	1
$\alpha_5$	-0.03	-0.04	-0.07	-1/3
$\alpha_6$	0.51	0.55	0.77	1
$\alpha_7$	-0.12	-0.13	-0.19	-1/3
$\alpha_8$	0.69	0.61	1.03	1
$\alpha_9$	-0.03	-0.01	-0.02	-1/3

Из данных Табл. 9 видно, что для всех трех изучавшихся поликристаллических сплавов Au-10, 17, 25 ат.%Cu значения параметров ближнего порядка для нечетных координационных сфер оказались отрицательными, а для четных положительными. Подобное распределение знаков также характерно, как для сверхструктуры  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , так и для монокристалла  $\text{CuAu}_3$  [18]. Эти результаты указывают, что в

поликристаллических неупорядоченных твердых растворах золото-медь, богатых золотом, реализуется ближний порядок, характерный для сверхструктуры  $\text{Cu}_3\text{Au}$ . Однако, значения параметров ближнего порядка сплавов Au-10, 17, 25 ат.%Cu на шестой сфере  $\alpha_6$  завышены для соответствующих составов. Также из данных таблицы видно, что параметр  $\alpha_8$  сплава Au-25 ат.%Cu превышает единицу, что недопустимо. Этот параметр для сплавов Au-10, 17 ат.%Cu также завышен. Из этого анализа можно сделать вывод, что значения параметров ближнего порядка поликристаллических сплавов Au-10, 17, 25 ат.%Cu с шестого по десятой сфере не достоверны, что согласуется с выводами факторного анализа, проведенного для сплава Ni-13.1 ат. % W, и с результатом [17], где определены параметры ближнего порядка на первых пяти сферах неупорядоченного раствора Cu-25ат.% Au из интенсивности ДРПЛ с применением функции парного распределения, а на шестой, седьмой и восьмой сферах параметры ближнего порядка соответствуют беспорядку.

Из интенсивности ДРПЛ сплавом Cu -25 ат.%Au, измеренной ранее другими авторами [19], мы определили параметры ближнего порядка на первых девяти сферах с учетом статических смещений через значения модулей упругости сплава и без учета статических смещений. Параметры ближнего порядка на первых семи сферах, полученные без учета смещений по знаочередованию и по порядку величин находятся в согласии с результатами [19], где линейный и квадратичный размерные эффекты учитывались на первой координационной сфере. Это видимо, обусловлено тем, что в сплаве стехиометрического состава статические смещения малы.

В конце пятой главы из уравнений Каули и Кривоглаза-Клэппа-Мосса выведено выражение для критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок для ГЦК сплавов через значения энергий упорядочения на первых пятнадцати координационных сферах:

$$T_c = -\frac{2c_{ACB}}{k_B} (4W_1 + 6W_2 - 8W_3 + 12W_4 - 8W_5 + 8W_6 - 16W_7 + 6W_8 - 4W_9 - 8W_{10} + 24W_{11} - 8W_{12} + 24W_{13} - 16W_{14} - 8W_{15}). \quad (26)$$

Это выражение применено для расчетов критических температур в сплавах Cu -25, 50, 75 ат.%Au через значения энергий упорядочения на первых восьми-одиннадцати координационных сферах, которые рассчитаны по уравнениям Каули и Кривоглаза-Клэппа-Мосса с применением данных о параметрах ближнего порядка монокристаллических сплавов, имеющих в литературе [18]. Из сопоставления результатов расчетов с экспериментальными значениями критических температур, отмеченных на фазовой диаграмме системы медь-золото сделан вывод, что с применением экспериментальных значений параметров ближнего порядка имеется возможность оценки критической температуры  $T_c$  фазового перехода порядок-беспорядок.

В **седьмой** главе представлены результаты исследования методом ДРПЛ ближнего порядка в ГПУ сплаве Mg-10 ат.% In с различием координационных сфер с близкими радиусами. В обработке интенсивности ДРПЛ сплавом после сплавления применялись выражения (8)-(9) в рамках метода флуктуационных волн по методике [5], где в выражениях динамической матрицы и квази-упругих сил применяются модули упругости магния. В основе методики определения параметров ближнего порядка лежит адекватный учет эффектов статических смещений и использование вариационных процедур. В частности, для определения радиуса корреляции проводилась вариация по числу координационных сфер, вводимых в расчет при определении параметров ближнего порядка.

Результаты расчетов модулирующих функций  $F(\mathbf{q}, \rho_{11})$  и  $F(\mathbf{q}, \rho_{12})$  для первых двух пар координационных сфер с близкими радиусами приведены на Рис.7, где кривая Mod.Fun1 соответствует функции  $F(\mathbf{q}, \rho_{11})$  для первой координационной сферы с радиусом равным 3.194 Å, а кривая Mod.Fun2 - функции  $F(\mathbf{q}, \rho_{12})$  для второй сферы с радиусом 3.197 Å. Видно, что эти кривые существенно различаются между собой. Так, на первой из них при  $q \approx 1.3$  имеется слабо выраженный максимум, а на второй - ярко выраженный минимум. В изучаемом сплаве имеется еще пара координационных сфер с практически одинаковыми радиусами – это пятая и шестая сферы. Их радиусы соответственно равны 5.336 и 5.337 Å. Отвечающие им функции соответствуют кривым Mod.Fun5 и Mod.Fun6 на Рис. 7. Несмотря на то, что радиусы этих координационных сфер практически совпадают между собой по величине, зависимости кривых Mod.Fun5 и Mod.Fun6 от  $q$  существенно различаются между собой. Подобное различие зависимостей функций  $F(\mathbf{q}, \rho_{11})$  и  $F(\mathbf{q}, \rho_{12})$  от  $q$ , даже при практически совпадающих радиусах координационных сфер, свидетельствует о различной ориентационной зависимости статических смещений для атомов, располагающихся в разных подрешетках.

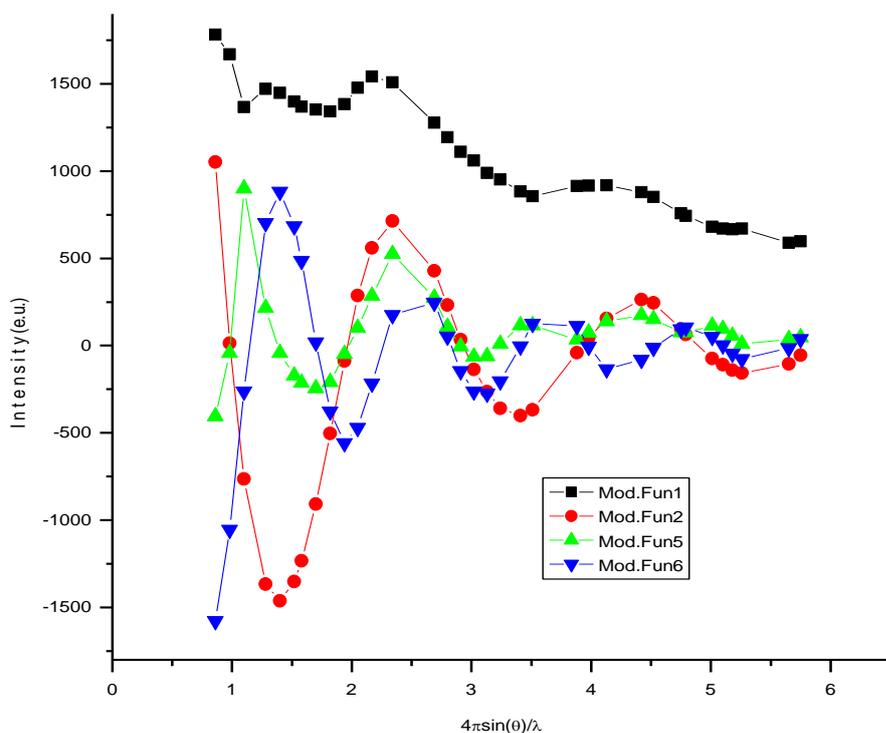


Рис. 7. Зависимости модулирующих функций ближнего порядка от  $q = 4\pi\sin\theta/\lambda$  для двух пар координационных сфер с близкими радиусами в сплаве Mg-10 ат.% In.

Значения параметров ближнего порядка на первых десяти сферах в сплаве Mg-10 ат.%In (после сплавления) приведены в четвертом столбце Табл. 10. Там также даны значения координационных чисел  $C_i$ , радиусов координационных сфер  $R_i$ , величины параметров ближнего порядка для сверхструктуры  $Mg_3Cd$ . Сопоставляя их с параметрами  $\alpha_i$  для изучаемого сплава Mg-10ат.%In, видим, что наблюдается совпадение по знаку для первых четырех и шестой координационных сфер. Это свидетельствует о том, что в сплаве Mg-10ат.%In устанавливается ближний порядок по типу дальнего порядка  $Mg_3Cd$ . Несовпадение по знаку параметров  $\alpha_i$  для больших

координационных сфер с соответствующими значениями сверхструктуры  $Mg_3Cd$  связано с концентрационным разупорядочением.

Табл. 10. Значения параметров ближнего порядка  $\alpha_i$  сплава  $Mg-10at.\%In$

$i$	$C_i$ коорд число	$R_i$ радиу с сфер ы, Å	$\alpha_i$ после сплавл ения	$\alpha_i$ отжиг 200°C	$\Delta r_i,$ Å	$W_i,$ $k_B$	$\alpha_i$ для $Mg_3Cd$
1	6	3.194	-0.060	-0.035	-0.06	82.2	-0.333
2	6	3.197	-0.064	-0.003	0.09	-169.8	-0.333
3	6	4.519	0.105	-0.058	0.06	141.8	1
4	2	5.219	0.789	0.436	0.00	-696.5	1
5	12	5.536	0.015	0.004	0.01	7.7	-0.333
6	6	5.537	-0.112	-0.010	-0.02	62.8	-0.333
7	12	6.116	0.000	-0.036	-	206.3	-0.333
8	6	6.394	-0.042	-0.021	-	93.9	1
9	12	7.147	0.028	-	-	-	-0.333
10	12	7.606	-0.009	-	-	-	1

С применением значений параметров ближнего порядка по формуле Каули, представленным нами для ГПУ структуры в виде системы десяти уравнений, с учетом экспериментальных параметров ближнего порядка на первых десяти сферах рассчитаны энергии упорядочения на первых десяти сферах. С применением последних выведено выражение для критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок для сплавов с ГПУ структурой.

В **восьмой главе** представлены результаты учета статических смещений атомов в ДРРЛ бинарными сплавами с применением силовых постоянных межатомного взаимодействия. При этом амплитуды волн  $A_q$  статических смещений в кубических сплавах рассчитывались из уравнений (2), где фигурируют динамическая матрица  $D(\mathbf{q})$  и Фурье-образ квазиупругих сил  $P(\mathbf{q})$ , которые выражаются через силовые постоянные межатомного взаимодействия и компонент квазиупругих сил.

В случае сплава  $Ni-13.1 \text{ ат.}\% W$  силовые постоянные межатомного взаимодействия и компоненты квазиупругих сил представлены в виде первых и вторых производных потенциала парного взаимодействия  $V(R)$ , рассчитанного с применением модельного потенциала Анималу. В результате расчетов модулирующих функций  $\Phi_i(\mathbf{q})$  ( $i=1, \dots, 8$ ) для сплава  $Ni-13.1at.\%W$  выявлены значительные статические смещения атомов на первой, второй, пятой и восьмой координационных сферах. Например, на Рис.8 показаны графики модулирующих функций  $\Phi_1(\mathbf{q})$  для первой координационной сферы сплава  $Ni-13.1at.\%W$ , рассчитанные при учете статических смещений с применением силовых постоянных в модели Борна Бегби по методике [3] и без учета смещений. Из Рис. 8 видно, что график модулирующей функции  $\Phi_1(\mathbf{q})$ ,

рассчитанной с применением силовых постоянных и коэффициентов межатомных сил, на всех интервалах углов рассеяния отличается от графика функции, рассчитанной без учета статических смещений. Особенно заметно это различие на третьем интервале, что указывает на значительные статические смещения атомов на первой координационной сфере сплава Ni-13.1ат.%W. Между тем, график модулирующей функции, рассчитанной согласно модели Борна-Бегби [3], едва заметно отличается от графика модулирующей функции без учета статических смещений, что указывает на незначительные статические смещения атомов, которые согласуются с абсолютным значением параметра ближнего порядка на первой сфере  $\alpha_1$ , приведенной в Табл.3.

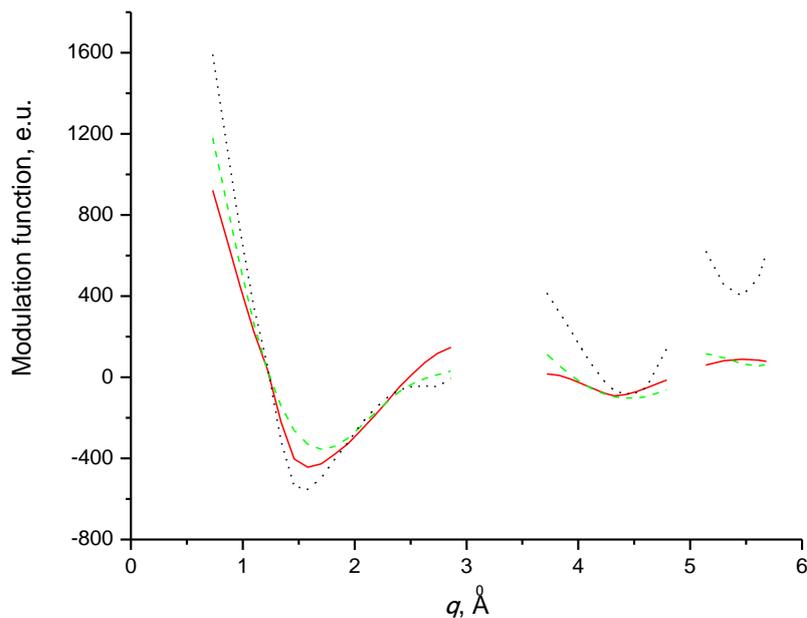


Рис. 8. Модулирующие функции на первой сфере сплава Ni-13.1ат.%W:  
— расчет без учета статических смещений;  
..... расчет с микроскопическим учетом статических смещений;  
- - - - расчет по методике [3] в модели Борна-Бегби.

Размерный эффект в сплаве Ni-14 ат.% Ir учтен нами методом флуктуационных волн с применением силовых постоянных никеля, которые получены в работе [20] из обработки экспериментального фонованого спектра в модели Борна-Кармана. В расчетах амплитуд статических смещений  $A_q$  атомов из уравнений (2) мы приравняли коэффициенты Фурье-образов компонент квазиупругой силы  $P_{qi}$  произведениям радиальных силовых постоянных  $\alpha_i^j$  и статических смещений  $\Delta r_i$  и варьировали значения статических смещений  $\Delta r_i$  на каждой координационной сфере до достижения минимума суммы квадратичных отклонений синтезированных согласно выражению (1) значений интенсивности ДРПЛ от экспериментальных значений. Полученные таким образом значения статических смещений на первых семи координационных сферах сплава Ni-14 ат.% Ir и соответствующие им параметры ближнего порядка даны в Табл. 11, откуда видно значительные смещения обнаружены на первой и третьей координационных сферах. Значения параметров ближнего порядка на первых пяти координационных сферах по знаку и по порядку величин согласуются с соответствующими параметрами, приведенными в Табл.4. Также заметно, что они по знаку согласуются с параметрами ближнего порядка для сверхструктуры  $L1_2$ , что подтверждает выводы, сделанные выше о типе упорядочения по этому типу.

Табл. 11. Параметры ближнего порядка, значения энергий упорядочения и статические смещения в сплаве Ni-14 ат.% Ir, параметры ближнего порядка сверхструктуры Ni<sub>3</sub>Ir

Номер сферы $j$	$\Delta r_j$ , Å	$\alpha_j$	$W_j/k_B$ , К	$\alpha_j$ в L1 <sub>2</sub>
1	0.0239	-0.037	88.5	-0.333
2	-0.0001	0.078	-129.4	1
3	0.0347	-0.015	18.9	-0.333
4	-0.0001	0.029	-1.2	1
5	0.0001	-0.010	9.1	-0.333
6	0.0007	0.060	-125.0	1
7	-0.0001	-0.007	4.6	-0.333

Значения энергий упорядочения на первых семи координационных сферах Ni-14 ат.% Ir, приведенные в Табл. 11, рассчитывались по формулам Каули через экспериментальные значения параметров ближнего порядка. С их использованием по формуле (25) рассчитано значение критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок равное  $T_c=315^\circ\text{C}$ , что не противоречит фазовой диаграмме системы Ni- Ir.

Учет статических смещений атомов в исследовании ближнего порядка в сплаве Fe-5 ат.%Re методом ДРПЛ проводился через значения силовых постоянных и параметров межатомного взаимодействия сплава, рассчитанных с применением модельного потенциала Анималу. Из интенсивности ДРПЛ сплавом Fe-5 ат.%Re были получены параметры ближнего порядка на первых девяти координационных сферах, которые совпадают со значениями параметров ближнего порядка для сверхструктуры B2, что указывает на тенденцию сплава к упорядочению по данному типу.

При учете статических смещений атомов в сплаве Fe-9 ат.%Re применялись силовые постоянные межатомного взаимодействия матрицы сплава, которые определены нами из экспериментального фононного спектра  $\alpha$ -Fe, измеренного другими авторами. С применением значений радиальных  $\bar{\alpha}_j$  и тангенциальных  $\bar{\beta}_j$  силовых постоянных  $\alpha$ -Fe для ОЦК структур составлялись элементы динамической матрицы по формулам (13) и выражения Фурье – образы компонент квазиупругих сил. Коэффициенты Фурье-образов компонент квазиупругой силы  $P_{qi}$  брали равным произведениям радиальных силовых постоянных  $\bar{\alpha}_j$  и статических смещений  $\Delta r_i$ , варьированием которого добивались минимума суммы квадратичных отклонений синтезированных согласно выражению (1) значений интенсивности ДРПЛ от экспериментальных значений. В итоге получены параметры ближнего порядка в сплаве Fe-9 ат.%Re равные  $\alpha_1 = -0.054$ ,  $\alpha_2 = 0.105$ ,  $\alpha_3 = 0.015$ ,  $\alpha_4 = -0.082$ ,  $\alpha_5 = 0.274$ ,  $\alpha_6 = -0.020$  при статических смещениях на первых четырех координационных сферах, которые соответственно равны 0.010, -0.004, -0.100 и -0.010 Å. На пятой и шестой сферах статические смещения не выявлены. С учетом значения  $\alpha_1$  для сплава Fe-9 ат.%Re и данных Табл.6 построена концентрационная зависимость параметра ближнего порядка на первой сфере в сплавах Fe-3, 5, 7, 9 ат.%Re, показанная на Рис. 9.

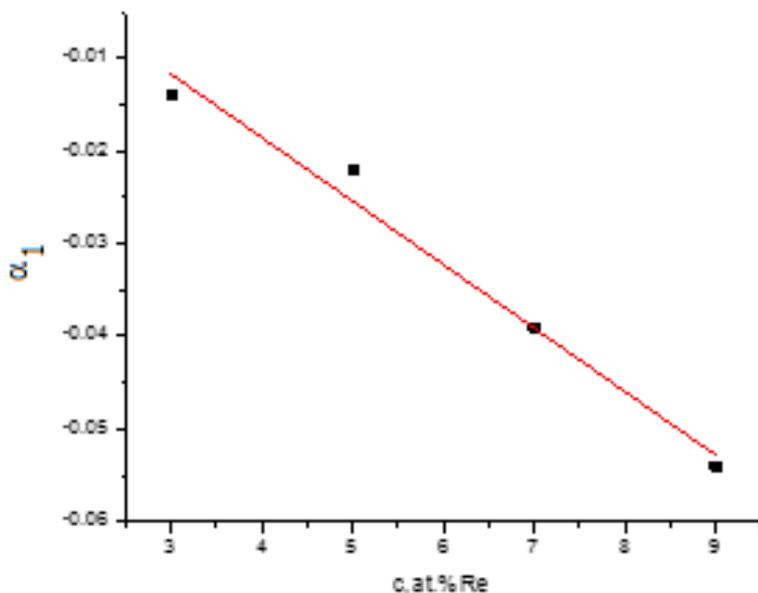


Рис. 9. Концентрационная зависимость параметра ближнего порядка на первой сфере  $\alpha_1$  в сплавах Fe-Re.

В конце восьмой главы приведены результаты обработки интенсивности ДРРЛ сплава Mg-10 at.%In, отожженного при 200°C (Рис. 10). Экспериментальная интенсивность была представлена в виде выражений (8), амплитуды статических смещений рассчитывались из уравнений (9), куда входят выражения (8) динамической матрицы ГПУ решетки. В выражениях динамической матрицы и квази-упругих сил входят силовые постоянные магния, которые имеются в литературе.

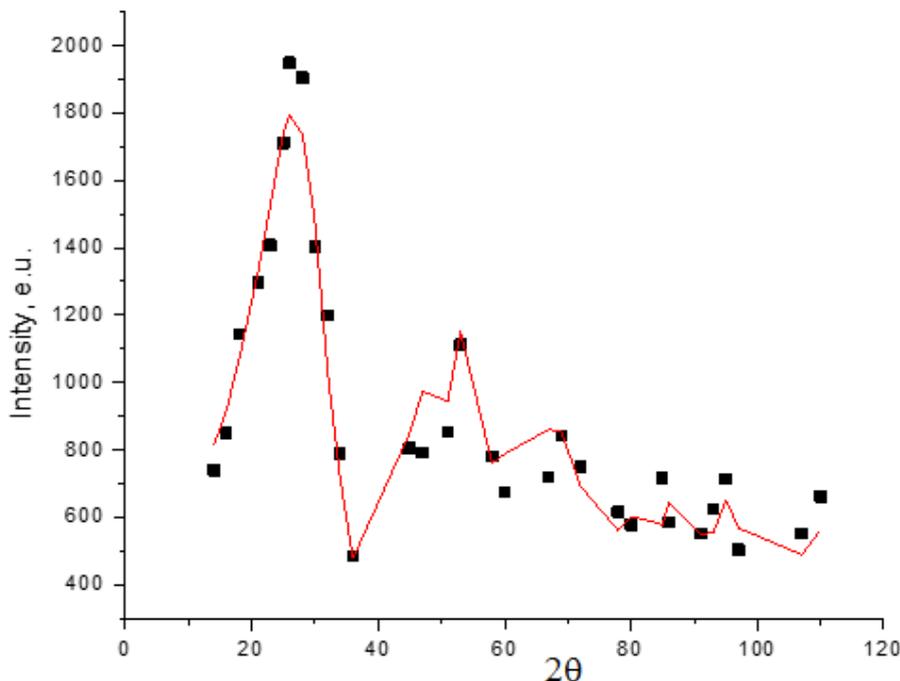


Рис.10. Интенсивность ДРРЛ отожженным сплавом Mg-10at.%In: ■ - экспериментальные точки, — - синтезированная кривая.

Коэффициенты Фурье-образов компонент квазиупругой силы  $P_{qi}$  мы выразили через произведение радиальных силовых постоянных  $\bar{\alpha}_j$  и статических смещений  $\Delta r_i$ , варьированием которого добивались минимума суммы квадратичных отклонений синтезированных согласно выражению (8) значений интенсивности ДРРЛ от экспериментальных значений, представленных на Рис.11. В пятом и шестом столбцах Табл. 10 приведены параметры ближнего порядка  $\alpha_i$  и статические смещения  $\Delta r_i$  отожженного сплава Mg-10at.%In. Видно, что параметры ближнего порядка на первой,

второй, шестой и восьмой сферах совпадают по знаку с соответствующими параметрами ближнего порядка сплава после сплавления. Но параметр ближнего порядка на третьей сфере отожженного сплава отличается по знаку от соответствующего параметра сплава после сплавления. С применением полученных значений параметров ближнего порядка построена синтезированная кривая интенсивности  $I(2\theta)$ , которая показана на Рис. 10. Видно, синтезированная кривая удовлетворительно описывает экспериментальные точки ДРРЛ отожженного образца Mg-10ат.%In. Выявлены статические смещения на первой, второй, третьей, пятой и шестой сферах координационных сферах. С применением полученных параметров ближнего порядка рассчитаны энергии упорядочения сплава Mg-10ат.%In, отожженного сплава, что представлено в седьмом столбце Табл. 10. Через значения энергий упорядочения оценена критическая температура  $T_C$  фазового перехода порядок-беспорядок сплава Mg-10ат.%In равная - 132°C, которая не противоречит фазовой диаграмме системы Mg-In.

В девятой главе представлены результаты расчетов энергий упорядочения и параметров ближнего порядка сплавов Cu-25ат.%Au, Ni-14 ат.%Pt, Ni-22.5ат.%Fe и Ni-11 ат.%Cr методом псевдопотенциала с учетом размерного эффекта. В работе [21] был предложен метод расчета энергий упорядочения на произвольной координационной сфере с учетом размерного эффекта. Выражение конфигурационной энергии неупорядоченного твердого раствора с учетом статических смещений, обусловленных размерным эффектом, имеет вид [21]:

$$E_{\text{конф}} = A_0 - B_0 + c_A c_B \sum_{i \neq 0} C_i \alpha_i [A(r_i) - B(r_i)], \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} A_0 &= c_A c_B \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \int |\Delta w(q)|^2 \varepsilon(q) \chi(q) dq + c_A c_B \frac{2}{\pi} \int \frac{e^{-q^2/4\eta}}{q^2} (\Delta Z^*)^2 q^2 dq, B_0 = \\ &= \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \sum_i C_i \int [C_A^2 w_A(q) \Delta_{AAi} - C_B^2 w_B(q) \Delta_{BBi}] \Delta w^*(q) \varepsilon(q) \chi(q) \left( \cos(qR_i) - \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} \right) q^2 dq - \\ &- \frac{2}{\pi} \sum_i C_i \int \frac{e^{-q^2/4\eta}}{q^2} [C_A^2 Z_A^* \Delta_{AA,i} - C_B^2 Z_B^* \Delta_{BB,i}] \Delta Z^* \left( \cos(qR_i) - \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} \right) q^2 dq. \end{aligned}$$

$A(r_i)$  – доля энергии упорядочения, записанная без учета размерного эффекта:

$$A(r_i) = \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \int |\Delta w(q)|^2 \varepsilon(q) \chi(q) \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} q^2 dq + \frac{2}{\pi} \int \frac{e^{-q^2/4\eta}}{q^2} (\Delta Z^*)^2 \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} q^2 dq. \quad (28)$$

$B(r_i)$  – доля энергии упорядочения с учетом линейного размерного эффекта:

$$\begin{aligned} B(r_i) &= \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \int [w_A(q) \Delta_{AAi} - w_B(q) \Delta_{BBi}] \Delta w^*(q) \varepsilon(q) \chi(q) \left( \cos(qR_i) - \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} \right) q^2 dq + \\ &+ \frac{2}{\pi} \int \frac{e^{-q^2/4\eta}}{q^2} [Z_A^* \Delta_{AA,i} - Z_B^* \Delta_{BB,i}] \Delta Z^* \left( \cos(qR_i) - \frac{\sin(qR_i)}{qR_i} \right) q^2 dq, \end{aligned} \quad (29)$$

$\alpha_i$  – параметр ближнего порядка на  $i$ -ой координационной сфере радиуса  $r_i$ ,  $C_i$  – координационное число,  $C_A$ ,  $C_B$  – концентрации компонент,  $Z_A^*$ ,  $Z_B^*$  – эффективные валентности компонент сплавов,  $w_A$ ,  $w_B$  – неэкранированные формфакторы модельных потенциалов. Параметры  $\Delta_{AA,i}$  и  $\Delta_{BB,i}$  рассчитываются с использованием схемы изменения размеров атомов при образовании твердого раствора. Предположим, что зависимости размеров атомов от концентрации сплава близки к линейным и параллельны между собой, что показано на Рис 10. Эти зависимости изображены сплошными линиями. Пусть  $r_{AA}^0$  и  $r_{BB}^0$  – межатомные расстояния в чистых металлах, а

$r_{AA}$  и  $r_{BB}$  - в сплаве. Тогда можно выразить зависимости размеров атомов от концентрации сплава в виде:

$$r_{AA} = r_{AA}^0 + \frac{r_{BB}^0 - r_{AA}^0}{K} C_B, \quad (30)$$

$$r_{BB} = r_{BB}^0 + \frac{r_{BB}^0 - r_{AA}^0}{K} C_A. \quad (31)$$

В выражениях (30) и (31)  $K$  является параметром, определяющим наклон зависимостей, показанных на Рис 11.

С учетом вышеприведенных соображений, параметры смещений атомов компонент имеют вид:

$$\Delta_{AA,i} = \frac{r_{AA,i}^1}{r_i} - 1, \quad (32)$$

$$\Delta_{BB,i} = \frac{r_{BB,i}^1}{r_i} - 1. \quad (33)$$

В этих выражениях  $r_i$  - радиус  $i$  - той координационной сферы сплава. На Рис. 11 зависимость  $r_i$  ( $C_B$ ) изображена сплошной линией, помеченной цифрой 2. Каждое конкретное значение  $K$  отвечает определенным значениям  $\Delta_{AA,i}$  и  $\Delta_{BB,i}$  и соответственно спектру значений  $B(r_i)$ , который является составляющим спектра значений энергий упорядочения:

$$V(r_i) = A(r_i) - B(r_i). \quad (34)$$

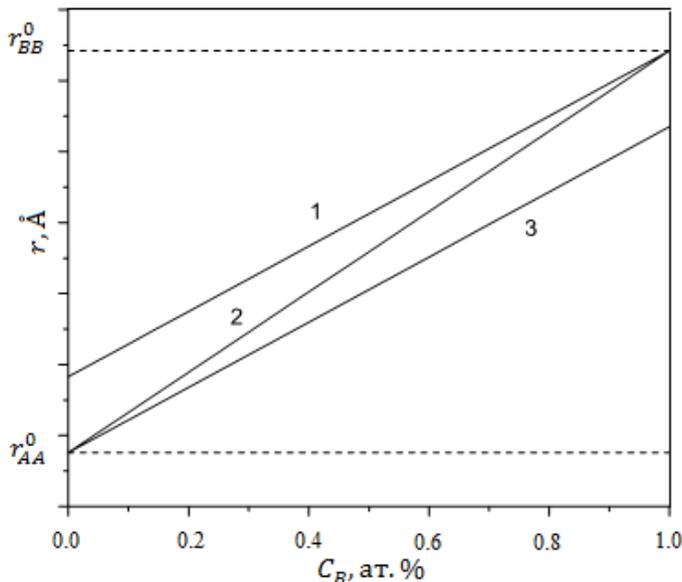


Рис.11. Предполагаемые зависимости размеров атомов сортов  $A$  и  $B$  от концентрации сплава для  $i$  - ой координационной сферы: 1 - для атомов сорта  $B$ ; 3 - для атомов сорта  $A$ ; 2 - радиус  $i$  - ой координационной сферы в твердом растворе.

Известно, что через спектр значений упорядочения  $V(r_i)$  можно рассчитать критическую температуру  $T_C$  фазового перехода порядок-беспорядок с применением выражений (25) для сплавов типа  $Cu_3Au$ . Поэтому мы применили метод расчета значений энергий упорядочения  $V(r_i)$ , которые соответствуют экспериментальному значению критической температуры  $T_C$  сплава. В вышеприведенном выражении (34) для составляющего  $B(r_i)$  входят параметры искажений (32) и (33), которые, как выше сказано, зависят от параметра  $K$ . С учетом этого по параметру  $K$  проводилась подгонка спектра  $V(r_i)$  под экспериментальное значение  $T_C$  критической температуры. По описанной методике рассчитаны энергии упорядочения сплава  $Cu-25 \text{ ат.}\%Au$  на первых четырнадцати сферах, с применением которых в приближении Кривоглаза-Клэппа-Мосса оценены параметры ближнего порядка, удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными данными [18].

В случае сплава Ni-14 at.%Pt подгоночный параметр  $K$  варьировался до получения минимума суммы среднеквадратичных отклонений рассчитанных значений  $\alpha_{theor}$  от соответствующих экспериментальных значений  $\alpha_{exp}$ , показанных в Табл. 5. Результаты расчетов энергий упорядочения показали, что на первой сфере вклад энергии  $B_1(r_1)$  по абсолютной величине в два раза превышает составляющую  $A_1(r_1)$ . Последнее указывает на важность учета статических смещений при оценке энергий упорядочения в твердых растворах. На всех других координационных сферах вклад энергии  $B_1(r_i)$  является преобладающим. Значения энергий упорядочения  $V(r_i)$  сплава Ni-14 at.%Pt получены при подгоночном параметре  $K$  равном 1.233. С использованием полученных значений энергий упорядочения была оценена критическая температура фазового перехода порядок-беспорядок в сплаве Ni-14 at.%Pt, которая равна 519°C и согласуется с фазовой диаграммой системы никель-платина.

Подгонка теоретически рассчитываемых параметров ближнего порядка сплава Ni-22.5 at.%Fe под экспериментальные значения параметров ближнего порядка, измеренных методом ДРРЛ в [22], проводилась по двум параметрам:  $K_A$  и  $K_B$ . Последние подставляются соответственно в выражения (29) и (30) вместо параметра  $K$ . При этом были рассчитаны значения энергий упорядочения  $V(r)$ , составляющих  $A_1(r_i)$  и  $B_1(r_i)$  сплава Ni-22.5at.% Fe на первых семнадцати координационных сферах. С применением полученных значений энергий упорядочения  $V(r_i)$  по формуле (25) была оценена критическая температура  $T_C$  фазового перехода порядок-беспорядок сплава Ni-22.5at.% Fe равная 751К, которая находится в согласии с критической температурой 789К для сплава Ni-27 at.% Fe, приведенной на фазовой диаграмме системы Fe-Ni. Отвечающие минимуму среднеквадратичных отклонений теоретических значений параметров ближнего порядка от экспериментальных значений, индивидуальные парные смещения равны  $\Delta_{NiNi} = 0.019\text{\AA}$  и  $\Delta_{FeFe} = -0.060\text{\AA}$ .

Аналогичным методом были рассчитаны энергии упорядочения  $V(r_i)$ , составляющих составляющих  $A_1(r_i)$  и  $B_1(r_i)$  для сплава Ni-11at.%Cr на первых пятнадцати координационных сферах с применением параметров ближнего порядка, которые измерены в [23] нейтронографическим методом. Суммы квадратичных отклонений между теоретическими  $\alpha_{theor}$  и экспериментальными  $\alpha_{exp}$  значениями [23] параметров ближнего порядка сплава минимизированы варьированием параметров  $K_A$  и  $K_B$ , с учетом которых сделан вывод, что, несмотря на близость атомных радиусов никеля и хрома, средние расстояния между соседними атомами никеля выросли на 0.0096 Å, а средние расстояния между атомами хрома уменьшились на 0.0553 Å.

**В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы:**

1. При расчетах амплитуд статических смещений атомов с применением значений модулей упругости сплава, рассчитанных методом псевдопотенциала, или матрицы, достоверно можно определить параметры ближнего порядка на первых четырех-шести координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой и на четырех сферах в сплавах с ОЦК структурой, что подтверждается на основе данных исследования ближнего порядка в бинарных поликристаллических растворах замещения методом ДРРЛ. Этот подход позволил выявить концентрационную зависимость параметра ближнего порядка на первой координационной сфере системе Ni-W; показать существование ближнего порядка по типу одиночной примеси в сплаве Ni-1.6 at.%W; выявить стабилизирующую роль ближнего порядка в формировании кристаллической структуры сплава Ni-6 at.%W; в сплаве Mg-10 at.%In отдельно

определить параметры ближнего порядка на близких координационных сферах и доказать, что ближний порядок формируется по типу дальнего порядка  $Mg_3Cd$ . Для сплавов Ni-14 ат. %Pt, Ni-14 ат. %Ir, Au-10,17 и 25% Cu также предсказан тип сверхструктуры.

2. Разработан метод учета вклада статических смещений атомов в интенсивности ДРРЛ поликристаллическими сплавами с использованием значений силовых постоянных межатомного взаимодействия. Такой подход в исследовании ближнего порядка в поликристаллических сплавах впервые позволил провести оценку статических смещений атомов в сплавах Ni-14 ат. %Ir, Mg-10 ат. %In и Fe- 9 ат. %Re, предсказать тип сверхструктуры в сплаве Fe- 5 ат. %Re.
3. Получен новый вид динамической матрицы для ОЦК, ГЦК и ГПУ структур, позволяющий проводить оценку силовых постоянных межатомного взаимодействия и модулей упругости в сплавах с учетом произвольного числа координационных сфер. Для применения динамической матрицы в расчетах амплитуд статических смещений атомов компонент сплава, описания экспериментальных фононных спектров, оценки в длинноволновом приближении значений модулей упругости металлов и сплавов достаточно учесть межатомное взаимодействие на первых трех-девяти координационных сферах. На основе полученных соотношений рассчитаны модули упругости ОЦК щелочных металлов Li, K, Na, Rb, Cs, ГЦК металлов Ni, Fe, Cu, Ag, Pd, ГПУ металлов Mg, Ti, Zr, Co, а также сплавов  $Cu_{0.75}Zn_{0.25}$ ,  $Ni_{0.804}Cr_{0.196}$ ,  $Ni_{0.502}Fe_{0.498}$ ,  $Ni_{0.738}Fe_{0.262}$ ,  $Ni_{0.892}Fe_{0.108}$ ,  $Fe_{0.76}Cr_{0.12}Ni_{0.12}$ ,  $Fe_{0.705}Cr_{0.175}Ni_{0.120}$  и  $Fe_{0.685}Cr_{0.145}Ni_{0.145}Mo_{0.025}$ , удовлетворительно совпадающие с экспериментальными данными.
4. Разработан метод уточнения фазовых диаграмм бинарных сплавов путем оценки критических температур фазового перехода порядок – беспорядок. Для определения критической температуры фазовых переходов порядок-беспорядок достаточно использовать значения энергий упорядочения на первых восьми координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой, четырех – с ОЦК структурой, восьми – с ГПУ структурой. На основе полученных соотношений с применением экспериментально определенных из ДРРЛ параметров ближнего порядка определены значения критических температур перехода в сплавах Ni-14 ат. %Pt, Ni-14 ат. %Ir, Mg-10 ат. %In и систем Fe-Re, Cu-Au, удовлетворительно совпадающие с экспериментальными данными.
5. Впервые установлено существование ближнего порядка в твердых растворах системы Fe-Re и разбавленном сплаве Fe-Rh; определены параметры ближнего порядка на первых четырех координационных сферах и их концентрационные зависимости. Доказана тенденция сплава Fe- 7 ат. %Re к упорядочению по типу сверхструктуры B2.
6. Размерный эффект оказывает значительное влияние на энергию упорядочения бинарных сплавов, что подтверждается теоретическими расчетами для сплавов Cu-25 ат. %Au, Ni-14 ат. %Pt, Ni-22.5 ат. %Fe и Ni-11 ат. %Cr. Показано, что учет статических смещений при расчетах энергии упорядочения бинарных сплавов повышает сходимость теоретических и экспериментальных результатов.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:

1. **Энхтор Л.** Дебаевская характеристическая температура, ближний порядок и устойчивость твердого раствора Ni-6 ат.% W / Силонов В.М., **Энхтор Л.** // Физика металлов и металловедение. – 1995. – Т.80, № 5. – С.79-85. IF=1,21 (РИНЦ), 0,7 печ. л., вклад автора- 0,5.
2. **Энхтор Л.** Ближний порядок в твердых растворах Fe-5 ат.% Re/ Силонов В.М., **Энхтор Л.** // Вестник Московского Университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 1997. – №3. – С. 37-38. IF=0,55 (РИНЦ) 0,2 печ. л., вклад автора-0,5.
3. **Enkhtor L.** Short-range order in Fe-Rh solid solutions / Silonov V.M., **Enkhtor L.** // Russian Physics Journal. – 1998. – V. 41, No. 3. – P. 255–259. SJR=0,297 (Scopus) 0,5 печ. л., вклад автора -0,5.
4. **Энхтор Л.** Расчет упругих постоянных многокомпонентных твердых растворов / Силонов В.М., Родин С.Ю., **Энхтор Л.** // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2000. – №. 3 – С.28-30. IF=0,55 (РИНЦ) 0,3 печ. л., вклад автора -0,4.
5. **Энхтор Л.** Исследование ближнего порядка в твердом растворе на основе магния в сплавах Mg-In./ Силонов В.М., Рохлин Л.Л., **Энхтор Л.**, Гляненко И.А., Чернокозов О.Б. // Металлы. – 2002. – №6. – С. 111-114. IF=0,36 (РИНЦ), 0,3 печ. л., вклад автора -0,4.
6. **Энхтор Л.** Экспериментальное и теоретическое исследование ближнего порядка в разбавленных твердых растворах Ni-W/ Силонов В.М., Скоробогатова Т.В., **Энхтор Л.** // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика и астрономия. – 2004. – №6. – С. 47-49. IF=0,55 (РИНЦ), 0,3 печ. л., вклад автора -0,4.
7. **Энхтор Л.** Упорядочение в твердом растворе Ni-13,1 ат.%W / **Энхтор Л.**, Силонов В.М. Перспективные материалы. – 2011. – №6. – С. 5-9. IF=0,31 (РИНЦ) 0,5 печ. л., вклад автора -0,8.
8. **Enkhtor L.** The short-range order and ordering energies in gold-copper polycrystalline alloys that are rich in gold / **Enkhtor L.**, Silonov V.M., Safronov P.P. // Moscow University Physics Bulletin. – 2014. – Vol. 69, No. 4. – P. 336–339. SJR=0,22 (Scopus) 0,4 печ. л., вклад автора -0,6.
9. **Enkhtor L.** Procedure for pseudopotential calculations of alkali metal elastic constants. / **Enkhtor L.**, Silonov V.M. // Bulletin of Russian Academy of Sciences: Physics. – 2014. – Vol. 78, No. 11. – P. 1163–1168. SJR=0,238 (Scopus), 0,6 печ. л., вклад автора -0,8.
10. **Enkhtur L.** On ordering in solid solutions of Cu-25 at % Au and Cu-75 at % Au. / **Enkhtur L.**, Silonov V.M., Safronov P.P. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2015. – Vol. 9, No. 2. – P. 326–330. SJR=0,18 (Scopus) 0,5 печ. л., вклад автора -0,6.
11. **Enkhtor L.** Short-range order in solid solutions of iron–rhenium. / **Enkhtor L.**, Silonov V.M. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2015. – Vol. 9, No. 5. – P. 1005-1011 SJR=0,18 (Scopus) 0,7 печ. л., вклад автора -0,8.
12. **Enkhtor L.** Calculation of the radial and tangential force constants of cesium from the experimental phonon spectrum. / **Enkhtor L.**, Silonov V.M., Galbadrakh R. // Journal of

- Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2015. – Vol. 9, No. 6. – P. 1262-1265. SJR=0,18 (Scopus), 0,4 печ. л., вклад автора -0,8.
13. **Enkhtor L.** The calculation of radial and tangential force constants for nickel using an experimental phonon spectrum / **Enkhtor L.**, Silonov V.M. // Moscow University Physics Bulletin. – 2016. – Vol. 71, No. 1. – P. 123–127. SJR=0,22 (Scopus), 0,5 печ. л., вклад автора -0,8.
  14. **Enkhtor L.** Short-range order and static displacements in polycrystalline Ni-13.1at. %W alloy / **Enkhtor L.**, Galbadrakh R., Silonov V. // Solid State Phenomena. – 2018. – Vol. 271. – P. 98-105. SJR=0,211 (Scopus) 0,5 печ. л., вклад автора -0,8.
  15. **Enkhtor L.** Short-range order in Ni-14 at. %Ir / **Enkhtor L.**, Silonov V., Y. Belov. Энхтор Л. Ближний порядок в сплаве Ni-14 ат.%Ir / Энхтор Л., Силонов В.М., Белов Ю.К. // RENSIT. – 2018. – Vol. 10, No. 1. – P. 53-58. SJR= 0,194 (Scopus) 0,4 печ. л., вклад автора -0,5.
  16. **Enkhtor L.** Estimation of the critical temperatures of order-disorder phase transitions in Cu-Au alloys using short-range order parameters/ **Enkhtor L.**, Silonov V.M. // Solid State Phenomena. – 2019. – Vol. 288. – P. 65-70. SJR=0,211 (Scopus), 0,4 печ. л., вклад автора -0,6.
  17. **Enkhtor L.** Short-Range Order and Its Energy Characteristics in the Ni-14 at % Pt Alloy. / **Enkhtor L.**, Silonov V.M. // Moscow University Physics Bulletin. – 2019. – Vol. 74, No. 2. – P. 181-185. SJR=0,22 (Scopus), 0,6 печ. л., вклад автора -0,6.
  18. **Enkhtor L.** New Method for Calculating Pairwise Effective Potential in Binary Solid Solutions. / Silonov V.M., **Enkhtor L.** // Moscow University Physics Bulletin. – 2020. – Vol. 75, No. 2. – P. 158–162. SJR=0,22 (Scopus), 0,5 печ. л., вклад автора -0,4.
  19. **Enkhtor L.** Calculation of ordering energies by the model potential method taking account the linear size effect in the Ni-14 at.%Pt alloy./ Silonov V.M., **Enkhtor L.** // RENSIT. – 2020. – Vol. 12, No. 2. – P. 235-240. SJR= 0,194 (Scopus), 0,4 печ. л., вклад автора -0,4.
  20. **Enkhtor L.** Calculation of Pairwise Effective Potentials in the Disordered Ni-22.5at.%Fe Alloy Using Model Potential Method with Account of Size Effect / Silonov V., **Enkhtor L.** // Solid State Phenomena. – 2021. – Vol. 323. – P. 125-129. JIF=0,536 (WoS), 0,3 печ. л., вклад автора -0,8.
  21. **Enkhtor L.** Static Displacements and Short-Range Order in Ni-14 at. % Ir Alloy/ **Enkhtor L.**, Silonov V., Gantulga Ts., Galbadrakh R., Amartaivan Ts., Odbadrakh Kh. // Solid State Phenomena. – 2021. – Vol. 323. – P. 159-165. JIF=0,536 (WoS), 0,4 печ. л., вклад автора -0,8.
  22. **Enkhtor L.** Short-Range Order and Size Effect in Ni–11 at % Cr Alloy / Silonov V., **Enkhtor L.** // Moscow University Physics Bulletin. 2021. – Vol. 76, No. 4. – P. 221–225. SJR=0,22 (Scopus), 0,5 печ. л., вклад автора -0,4.

#### **Иные публикации в рецензируемых научных журналах:**

1. Энхтор Л. Расчеты модулей упругости сплавов Ni-Fe методом псевдопотенциала. / Силонов В.М., Энхтор Л. // Ученые Записки Монгольского государственного университета. – 1998. – Т. 132, №3. – С. 170-177.
2. Энхтор Л. Ближний порядок в разбавленном сплаве Ni- W / Силонов В.М., Энхтор Л. // Ученые Записки Монгольского университета. – 1999. – Т. 147, №6. – С. 12-32.

3. **Энхтор Л.** Расчет некоторых параметров никеля с использованием модельного потенциала Анималу / Силонов В.М., **Энхтор Л.**, Шилагарди Г., Галбадрах Р. // Ученые Записки Монгольского университета. – 2004. – Т. 224, № 11. – С. 117 – 127.
4. **Энхтор Л.** Метод расчета модулей упругости щелочных металлов методом модельного потенциала / **Энхтор Л.**, Силонов В.М. // Ученые Записки Монгольского университета. – 2014. – Т. 397, №18. – С. 137-139.
5. **Enkhtor L.** New general equations for calculation of elements of dynamical matrix and elastic constants of BCC and FCC metals. / **Enkhtor L.**, Galbadrakh R., Silonov V.M. // International Journal of Advanced Research in Physical Science. – 2015. – Vol. 2. – P. 10-14.
6. **Энхтор Л.** Силовые и упругие постоянные металлов и сплавов / **Энхтор Л.**, Силонов В.М. // Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 68-86.
7. **Enkhtor L.** Short range order and static displacements of atoms in polycrystalline solid solution of Fe-5at. %Re / **Enkhtor L.**, Silonov V.M, Gantulga Ts. // Scientific transaction of the National University of Mongolia. Physics. – 2016. – Vol. 23, No. 455. – P.140-141.
8. **Энхтор Л.** К расчету силовых и упругих постоянных металлов с гексагональной плотноупакованной структурой / **Энхтор Л.**, Галбадрах Р., Силонов В.М., Дамдинов Б.Б.// Вестник Бурятского Государственного Университета. Химия. Физика. – 2018. – № 1. – С. 10-26.
9. **Энхтор Л.** Оценка упругих постоянных  $\gamma$ -Fe из экспериментального фононного спектра. / Лыгденов В.Ц., Гантулга Ц., Тувжаргал Н., **Энхтор Л.** // Вестник Бурятского Государственного Университета. Химия. Физика. – 2020. – № 1. – С.11- 14.
10. **Энхтор Л.** Расчеты силовых и упругих постоянных  $\alpha$ -Fe из экспериментального фононного спектра / Бадмаараг А., Лыгденов В.Ц., Гантулга Ц., **Энхтор Л.** // Вестник Бурятского Государственного Университета. Химия. Физика. – 2020. – № 2. – С. 3- 6.
11. **Enkhtor L.** Expressions for elements of dynamical matrix for HCP crystals / Myagmarsuren G., Amartaivan Ts., **Enkhtor L.** // Defects and Diffusion Forum. – 2024. – Vol. 436. – P. 155-162.

## Цитируемая литература:

1. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука. 1967. 336 стр.
2. Begbie G.H., Born M. Thermal scattering of X-rays by crystals. I. Dynamical foundation.// Proc. Roy.Soc. A.1947.V.188. P.179-188.
3. Кацнельсон А.А., Крисько О.В., Силонов В.И., Скоробогатова Т.В. Учет эффектов статических смещений атомов в диффузном рассеянии поликристаллическими ГЦК и ОЦК сплавами.// Деп. №4751.-М.:ВИНИТИ. 1983. 61 стр.
4. Силонов В.М. Микроскопическая теория ближнего порядка в твердых растворах. М.: Спектр. 2020. 285 стр.
5. Кривоглаз М.А., Тю Хао. Статические искажения и диффузное рассеяние рентгеновских лучей в твердых растворах с гексагональной плотноупакованной решеткой.// Металлофизика.1968. Т. 24. С. 63-83.
6. Силонов В.М., Евлюхина Е.В., Крисько О.В. Влияние межатомных корреляционных эффектов на ближний порядок в поликристаллических ГПУ-сплавах.// ФТТ. 1999. Т.41. С.2109-2115.
7. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка. 1983. 408 с.
8. Shyu W.M., Gaspari G.D. Screened interionic potential of the simple metals. // Phys.Rev. 1968. V.170. P.687-693.
9. Xie Y., Zhang J. Atomistic simulation of phonon dispersion for body-centered cubic alkali metals.// Can.J.Phys. 2008. V.86. P. 801-805.
10. Animalu A.O.E. Electronic structure of transition metals.I. Quantum defects and model potentials.// Phys.Rev. 1973. V. 8. N.8. P. 3542-3554.
11. Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C, Shyam, R. Model – potential study of the lattice dynamics and elastic constants of the Ni<sub>0.55</sub>Pd<sub>0.45</sub> alloy.// Phys.Rev.1991.V.44. P. 122-129.
12. Hearmon R.F.S. in Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, III/18, ed. K.-H. Hellwege and A.M. Hellwege. Springer, Berlin, 1984.
13. Leonov I., Poletaev A. I., Anosimov, D. Vollhardt V. I. Calculated phonon spectra of paramagnetic iron at the  $\alpha$ - $\gamma$  phase transition.// Phys.Rev.B.2012.V.85. P.020401(R)-1-4.
14. Zaretsky J., Stassis C. Lattice dynamics of  $\gamma$ -Fe Phys.// Rev. B.1987. V.35(9). P. 4500-4502.
15. Wang G.S., Delczeg-Czijak E.K., Hu Q. M., Kokko K., Johansson B., Vitos L. The effect of long-range order on the elastic properties of Cu<sub>3</sub>Au. // J. Phys.: Condens. Matter. 2013.V.25. P. 085401-1-10.
16. Chen Q., Sundman B. Calculation of Debye temperature for crystalline structures – a case study on Ti, Zr, and Hf.// Acta mater. 2001. V.49. P. 947-961.
17. Proffen Th., Petkov V., Biilinge S. J. L., Vogt T. Chemical short range order obtained from the atomic pair distribution function.// Z.Kristallogr. 2001. V. 16. P.1-5.
18. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М.: Наука. 1977. 255 стр.
19. Кацнельсон А.А., Сафронов П.П., Моисеенко В.Г., Силонов В.М. Ближний порядок и энергии упорядочения в сплавах золото-медь.//ФММ.1977. Т. 43. № 1. С. 111-115.
20. Maliszewski E., Bernardski S. Lattice dynamics of NiFe and Ni crystals.// Phys. Stat. Sol. (b) 1997. V. 200. P.435-444.

21. Кацнельсон А.А., Мехрабов А.О.О., Силонов В.М. О вкладе размерного эффекта в энергетические и структурные характеристики упорядочения, рассчитанные методом псевдопотенциала. //ФММ. 1976. Т.2, В.2, С. 279-283.
22. Jiang X., Ice G.E., Sparcs C.J., Robertson L., Zschack P. Local atomic order and individual pair displacements of  $\text{Ni}_{46.5}\text{Fe}_{53.5}$  and  $\text{Ni}_{22.5}\text{Fe}_{77.5}$  from diffuse X-ray scattering studies. Phys. Rev.B // 1996. V. 54. P. 3211-3227.
23. Schweika W. Haubold H.G. Neutron scattering and Monte Carlo study of short-range order and atomic interaction in  $\text{Ni}_{0.89}\text{Cr}_{0.11}$ .// Phys.Rev. B.1988. V.37. P.9240-9248.