

Ближний порядок и статические смещения в сплаве MG-10AT.%IN

Л. Энхтор¹, В. М. Силонов²

¹Монгольский государственный университет, 14201, Монголия, г. Улан-Батор, Их сургуулийн гудамж, 1, e-mail: enkhator@num.edu.mn

²Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, 119991, Россия, г. Москва, Ленинские горы, 1, стр.2, e-mail: silonov_v@mail.ru

Аннотация

В модели Де Лане предложена методика учета вклада, обусловленного статическими смещениями атомов, в диффузное рассеяние рентгеновских лучей бинарным твердым раствором с гексагональной плотноупакованной решеткой. Учет статических смещений атомов компонент на конкретной координационной сфере позволяет корректно определить из интенсивности рассеяния рентгеновских лучей спектр параметров ближнего порядка на первых восьми координационных сферах сплава Mg-10 ат. %In при раздельном определении параметров ближнего порядка на сферах с близкими радиусами. В расчете Фурье-образа статических смещений атомов на каждой учитываемой координационной сфере использовались элементы динамической матрицы и Фурье-образы квазиупругих сил, которые выражены согласно модели Де Лане и рассчитаны методом модельного потенциала.

Ключевые слова: диффузное рассеяние рентгеновских лучей, ближний порядок, статические смещения атомов, динамическая матрица, квазиупругие силы

Short Range Order and Static Displacements in MG-10AT.%IN Alloy

L. Enkhator¹, V. M. Silonov²

¹Department of Physics, National University of Mongolia, Ikh surguulin gudamj, 1, Ulaanbaatar, 14201, Mongolia, e-mail: enkhator@num.edu.mn

²Physics faculty, M.V.Lomonosov Moscow State University, Leninskie gori,1,Moscow 119991, Russia, e-mail: silonov_v@mail.ru

Abstract

Within De Launay model it is proposed the methodology for accounting of contributions caused by static displacements of atoms to X-ray diffuse scattering on the binary solid solutions with close packed hexagonal lattice. By accounting of static displacements of atoms on the particular shell we identified from the intensity of X-ray diffuse scattering short range order parameters on the first eight shells of Mg-10 at. %In alloy in case of separate definition of short-range order parameters on the shells with the close radii. The Fourier transform of static displacements of atoms on every considered shell has been calculated by using expressions of elements of dynamical matrix and Fourier transforms of quasi restoring forces, which derived from De Launay model and calculated by using pseudopotential method.

Keywords: X-ray diffuse scattering, short range order, static displacements of atoms, dynamical matrix, quasi restoring forces.

В случае искаженных монокристаллических твердых растворов выражение интенсивности диффузного рассеяния за вычетом побочных компонент можно написать в виде [1]:

$$I_1(\mathbf{q}_1) = N c_A c_B \sum_n \alpha(\mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_n} [\langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_q - (f_A - f_B)]^2, \quad (1)$$

где $\mathbf{q}_1 = 4\pi/\sin\theta/\lambda$, λ - длина волны рентгеновского излучения, θ - угол рассеяния, N - число атомов в элементарной ячейке, \mathbf{R}_n - радиус вектор n -ого узла кристаллической решетки в прямом пространстве, $\alpha(\mathbf{R}_n)$ - параметр ближнего порядка, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 - G_n$ есть вектор рассеяния, приведенный к первой зоне Бриллюэна, c_A и c_B - концентрации компонент A и B , $\langle f \rangle$ - средний форм-фактор рассеяния кристалла, f_A и f_B - атомные форм-факторы компонент сплава.

Для определения параметров ближнего порядка $\alpha(\mathbf{R}_n)$ из интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) на концентрационных неоднородностях в искаженных поликристаллических неупорядоченных твердых растворах выражение (1) следует усреднить по всем ориентациям вектора \mathbf{q}_1 . С учетом разбиения на координационные сферы оно примет вид

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

где C_i - координационное число для i -ой координационной сферы с радиусом R_i .

Здесь $\langle \dots \rangle_{\varphi, \gamma}$ - усреднение по всем ориентировкам вектора рассеяния (в сферических координатах по углам φ, γ). Если статические смещения атомов сплава вызваны лишь флуктуациями концентрации, то смещения атомов можно представить в виде суперпозиции смещений для отдельных флуктуационных волн

$$\delta \mathbf{R}_{n\gamma} = i \sum_k \mathbf{R}_{k\gamma} e^{-i\mathbf{k} \mathbf{R}_{n\gamma}} = \sum_k \mathbf{A}_k c_k e^{-i\mathbf{k} \mathbf{R}_n}, \quad \mathbf{R}_k = \mathbf{A}_k c_k, \quad \mathbf{A}_{-k} = -\mathbf{A}_k. \quad (3)$$

Выражения (3) связывают амплитуды волн статических смещений атомов и флуктуационных волн концентрации. При рассмотрении статических смещений концентрационные волны можно считать

заданными, если известны средние $\langle |c_{\mathbf{q}}^2| \rangle = \frac{1}{N} c_A c_B \sum_{\mathbf{q}} \alpha_j \cos \mathbf{q} \mathbf{R}_j$. Поэтому задача нахождения компонент Фурье R_k сводится к нахождению векторных коэффициентов $A_i \equiv A(\mathbf{q})$, компоненты которых можно рассчитать из системы трех алгебраических уравнений [1]:

$$D_{m\tau}(\mathbf{q}) A_{\tau}(\mathbf{q}) = -i F_m(\mathbf{q}), \quad (4)$$

где $D_{m\tau}(\mathbf{q})$ - элементы динамической матрицы, $F_m(\mathbf{q})$ -компоненты Фурье-образа квазиупругой силы (индексы m и τ пробегает значения 1, 2, 3, индексам равным 1 соответствует ось x , индексам равным 2 соответствует ось y , индексам равным 3 соответствует ось z).

В модели Де Лане [2] мы расписали элементы динамической матрицы и Фурье-образы для гексагональной плотноупакованной решеткой и из системы уравнений (4) рассчитали $A_{\tau}(\mathbf{q})$ и подставили в выражение (2), что позволяет рассчитать из экспериментально измеренной интенсивности ДРПЛ методом наименьших квадратов спектр параметров ближнего порядка $\alpha(R_i)$.

Интенсивность $I_D(q_1)$ ДРПЛ сплава Mg-10 ат. %In показана на Рис. 1 черными квадратиками. Наличие диффузного максимума, расположенного в районе первых сверхструктурных рефлексов, однозначно свидетельствует о существовании в изучаемом твердом растворе ближнего порядка.

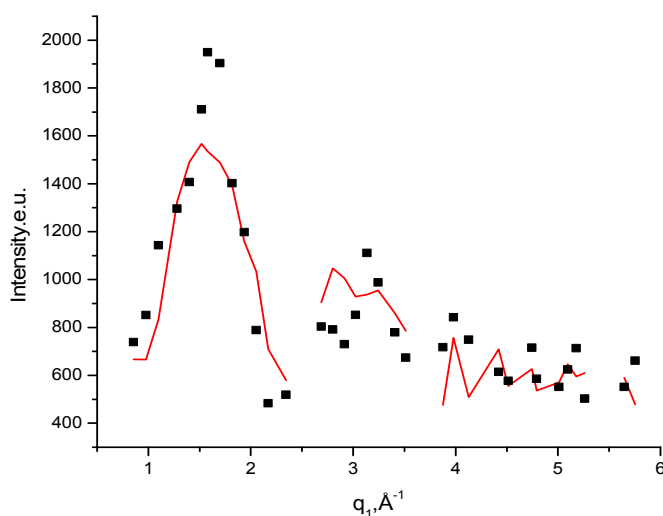


Рис. 1. Экспериментальные значения интенсивности ДРПЛ сплава Mg-10 ат. %In и синтезированная кривая в зависимости от модуля вектора рассеяния: ■-экспериментальные точки, —синтезированная кривая.

В работе [3] из интенсивности ДРПЛ, показанной в на Рис. 1, с использованием методики [4] были рассчитаны параметры ближнего порядка сплава Mg-10 ат. %In на первых десяти координационных сферах, которые приведены в Табл.1. Откуда заметно, что модуль параметра α_6 предельное значение для данного содержания индия в сплаве. В той же таблице приведен спектр значений параметров ближнего порядка сплава Mg-10 ат. %In на первых восьми сферах, рассчитанные в данной работе. Для сравнения в последнем столбце Табл. 1 приведены параметры ближнего порядка для сверхструктуры Mg_3Cd . Значение α_1 , рассчитанное в данной работе, близко к результату [3], а значение α_2 на по модулю на порядок меньше соответствующего значения, полученного в [3]. Рассчитанные нами значения параметра ближнего порядка на первых четырех сферах по знаку согласуются со значениями, полученными в [3], и предельными значениями, которые соответствуют сверхструктуре Mg_3Cd . На шестой сфере сравниваемые значения параметров ближнего порядка согласуются по знаку, но наш результат по модулю на два порядка меньше чем результат [3] и α_6 для Mg_3Cd . Полученные нами значения α_7 и α_8 по знаку согласуются соответствующими предельными значениями для сверхструктуры Mg_3Cd , чего нельзя констатировать для результата [3]. О достоверности полученного нами спектра параметров ближнего порядка сплава Mg-10 ат. %In можно судить сравнением синтезированной кривой интенсивности, построенной через значения параметров ближнего порядка по формуле (2), с экспериментальными значениями, что показано на Рис. 1. Видно, что на первом интервале углов синтезированная кривая описывает эксперимент за исключением трех точек в пике интенсивности. На втором интервале также три точки не описываются синтезированной кривой. На остальных интервалах можно отметить удовлетворительное согласие эксперимента и синтеза. Для лучшего описания эксперимента представляется увеличить количество учитываемых сфер.

Таблица 1. Координационные числа, значения радиусов координационных сфер, параметров ближнего порядка сплава Mg-10ат.%In и сверхструктуры Mg₃Cd

i	C_i	R_i	α_i [3]	α_i	α_i для Mg ₃ Cd
1	6	3.194	-0.060	-0.051	-0.333
2	6	3.197	-0.064	-0.007	-0.333
3	6	4.519	0.105	0.393	1
4	2	5.219	0.789	0.580	1
5	12	5.536	0.015	0.050	-0.333
6	6	5.537	-0.112	-0.005	-0.333
7	12	6.116	0.000	-0.001	-0.333
8	6	6.394	-0.042	0.011	1
9	12	7.147	0.028	-	-0.333
10	12	7.606	-0.009	-	1

Заключение

В данной работе поликристаллическом неупорядоченном твердом растворе с гексагональной плотноупакованной решеткой Mg-10ат.%In определены параметры ближнего порядка на первых 8 координационных сферах, в том числе и для сфер с практически одинаковыми радиусами. Методика основана на микроскопическом учете эффектов статических смещений и позволяет надежно разделять вклады координационных сфер с практически одинаковыми радиусами. Показано, что в сплаве Mg-10ат.%In ближний порядок формируется по типу дальнего порядка Mg₃Cd.

Литература

1. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М . Наука, 1967.-336 С.
2. De Launay J. The theory of specific heats and lattice vibrations // Solid State Physics 2, 219-303 (1956)
3. Силонов В.М., Рохлин Л.Л., Энхтор Лхамсурэнгийн, Глянченко И.А., Чернокозов О.Б.// Исследование ближнего порядка в твердом растворе на основе магния в сплавах Mg-In. Металлы, №6, 111-114 (2002).
4. Кривоглаз М.А, Тю Хао. Статические искажения и диффузное рассеяние рентгеновских лучей в твердых растворах с гексагональной плотноупакованной решеткой.//Металлофизика 24 , 63-70 (1968).

УДК53

doi: 10.18.101/978-5-9793-0883-8-201-203

The Comparing Calculations of X-RAY and Neutron Diffraction Intensities for ND₂FE₁₄B

I. Hishigdemberel^{*}, D. Sangaa¹

¹Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Sciences, 13330 Ulaanbaatar, Mongolia,

*e-mail: hishigee@ipt.ac.mn

Abstract

Time-of-Flight (TOF) neutron diffraction experiment carried out on hard magnetic material Nd₂Fe₁₄B at the High-Resolution Fourier Diffractometer (HRFD) of Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear research (JINR), Dubna, Russia. The atomic and structure factors, intensities of neutron diffraction reflections for crystal Nd₂Fe₁₄B have been calculated using Fortran package and MathLab program. A numerical results have been compared with neutron diffraction experimental data and calculation for X-Ray diffraction reflections.

Keywords: Nd₂Fe₁₄B, neutron diffraction, x-ray diffraction, atomic factor, structure factor.

Сравнительные расчеты для интенсивности рентгеновской и нейтронной дифракции кристалла ND₂FE₁₄B

И. Хишигдэмбэрэл^{*}, Д. Сангаа¹

¹Физико-Технологический Институт, Академия наук Монголии, 13330 г. Улан-Батор, Монголия

*e-mail: hishigee@ipt.ac.mn

Аннотация

Проведен TOF нейтронографинный эксперимент на магнитном материале Nd₂Fe₁₄B при высокой разрешающей способности Фурье дифрактометра (ФДВР) в Лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ), Дубна, Россия. Атомные и структурные факторы, интенсивности нейтронной дифракции отражений для кристалла Nd₂Fe₁₄B вычислили с помощью Fortran и программы MathLab. Также показаны численные результаты по сравнению с экспериментальными данными и проведен расчет для рентгеновских дифракционных отражений.

Ключевые слова: Nd₂Fe₁₄B, нейтронная дифракции, дифракция рентгеновских лучей, атомный фактор, структурный фактор.