

Министерство образования Украины
Киевский университет имени Тараса Шевченко

На правах рукописи
УДК 539.0; 539.1; 539.2

КУЛИШ Николай Поликарпович

**СТРОЕНИЕ И ПРИРОДА БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА
В БИНАРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ**

Специальность 01.04.07 — физика твердого тела

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Киев — 1993



00819991 (.)

Работа выполнена
им.Тараса

Официальные оппоненты

доктор физико-математических наук
Чуристов Константин Владимирович

доктор физико-математических наук
Михальченко Виктор Павлович

доктор технических наук
Белозу Михаил Вячеславович

Ведущая организация: Харьковский государственный университет
им.М.Горького (г.Харьков)

Защита состоится " 22 " марта 1993 г. в 10³⁰ часов
на заседании Специализированного совета Д 068.18.15 при Киевском
университете им.Тараса Шевченко (252127, г.Киев, пр.Глушкова, 64,
конференц-зал физического факультета ауд. 500)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Киевского
университета им.Тараса Шевченко. Отзыв на автореферат в двух
экземплярах, заверенные печатью учреждения просим направлять по
адресу: 252801, Киев-17, ГСП, ул.Владимирская, 64, секретарию Спе-
циализированного совета Д 068.18.15 проф.Охрименко Б.А. (физический
факультет)

Автореферат разослан " ____ " _____ 1993 г.

Ученый секретарь Специализированного
совета Д 068.18.15
доктор физ.-мат.наук

Б.А.Охрименко

ЛННБ ім. В. Стефаніка
АН України

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию строения ближнего порядка в металлических твердых растворах замещения, его влияния на ряд физических свойств, изучению электронной структуры сплавов с ближним и дальним порядком, а также выявлению физических факторов, определяющих природу ближнего упорядочения.

Актуальность темы. Одной из фундаментальных проблем при создании материалов с необходимыми свойствами является их структурно-фазовая стабильность в условиях длительного воздействия температуры, облучения, механических нагрузок и т.д. Способствовать ее решению могли бы исследования статистических межатомных корреляций, которые имеют место во всех изученных металлических твердых растворах замещения. Несмотря на то, что они влияют лишь на субтонкую структуру сплавов, их роль в изменении многих физических свойств является существенной и может в отдельных случаях даже превышать вклад, который вносится фазовыми превращениями.

Ближний порядок, как результат межатомных корреляций, масштаб которых соизмерим с межатомными расстояниями, определяется силами взаимодействия между атомами, что позволяет при его изучении находить важнейшие характеристики, влияющие на структуру сплавов — силовые постоянные. Более того, существующие методы дифракционных исследований позволяют разделять вклады химического, упругого, электронного взаимодействия и соответственно определять решеточные силовые постоянные нерелаксационной и релаксационной природы.

Компонента диффузного рассеяния рентгеновских лучей или тепловых нейтронов, обусловленная ближним порядком, связана с фурье-компонентой свободной энергии, что позволяет изучать ее в широком интервале температур и концентраций сплавов с последующим нахождением различных термодинамических величин, областей стабильности упорядоченных фаз и в конечном итоге позволяет осуществлять построение диаграмм состояния. Особый интерес при этом вызывает возможность изучения гармонической и негармонической составляющих свободной энергии, их физической природы с целью выявления типов фазовых переходов, особенностей предпереходных явлений для конк-

ретных систем.

Ряд важных физических характеристик в сплавах может быть получено при изучении кинетики установления равновесного состояния ближнего порядка. Так обычно применяемые методы определения концентрации точечных дефектов, их взаимодействия с примесями, используемые в чистых металлах, являются непригодными для сплавов из-за наличия в них ближнего порядка, релаксация которого, в свою очередь, зависит от концентрации и типа точечных дефектов. Исследования кинетики ближнего порядка в сплавах позволяет определить не только термодинамические и миграционные характеристики дефектов, но также на несколько порядков поднять точность в определении концентрации дефектов по сравнению с традиционными методами. При этом оказывается возможным получить микроскопические характеристики объемной диффузии в сплавах.

При исследовании ближнего порядка возможно прогнозирование структурно-фазовых превращений и, следовательно, радиационной стойкости материалов. Образование при облучении в макроскопически однородных сплавах фаз, близких или совпадающих по составу и структуре к высококонцентрационным фазам, связано исключительно с силами межатомного взаимодействия, которые могут быть получены при изучении ближнего порядка.

Исследования ближнего порядка твердых растворов осуществляется прямыми дифракционными, либо косвенными структурночувствительными методами. При этом обычно предполагается, что образующийся ближний порядок является гомогенным, хотя ряд исследований указывает на его неоднородный характер. Наличие неоднородного ближнего порядка объясняется как результат влияния косвенного дальнегодействующего взаимодействия атомов, обусловленного электронами проводимости. Отсюда следует, что изучение строения ближнего порядка необходимо проводить комплексными, включая как экспериментальные, так и теоретические методы, в том числе изучая одновременно поведение субтонок кристаллической и электронной структуры.

Попытки анализа природы ближнего упорядочения с привлечением теории псевдопотенциалов, несмотря на то, что позволили объяснить особенности межатомных корреляций для многих сплавов, приводят к неудовлетворительным результатам для твердых растворов на основе благородных и переходных металлов. При использовании других теоретических моделей отсутствуют выражения, которые бы явным

образом связывали параметры межатомных корреляций и дальнего порядка с энергией упорядочения, что не позволяет применять их для конкретных сплавов.

Таким образом, на основе вышеизложенного можно сделать заключение, что настоящая работа посвящена актуальной проблеме.

Цель работы состояла в установлении строения ближнего порядка и его влияния на электронную структуру, а также определение физических факторов, ответственных за формирование ближнего порядка в металлических твердых растворах замещения.

Научная новизна работы определяется совокупностью результатов, сформулированных в заключении диссертации и приведенных в конце автореферата. Основные существенные новые результаты диссертационной работы состоят в следующем:

- в области твердых растворов замещения сплавов Cu-Al и Ag-Al измерена концентрационная зависимость плотности электронных состояний на уровне Ферми $g(\mu_0)$ для нескольких обработок с различным состоянием ближнего порядка. Для обоих сплавов и всех обработок концентрационная зависимость $g(\mu_0) = f(c)$ - немонотонна и кроме отожженных сплавов Ag-Al характеризуется наличием максимума;

- ближнее упорядочение сплавов Cu-Al и Ag-Al во всей области концентраций обуславливает уменьшение плотности электронных состояний на уровне Ферми. На основании этого сделано предположение, что при образовании ближнего порядка в твердых растворах замещения на кривой плотности электронных состояний в области энергии Ферми появляется провал, величина которого определяется степенью ближнего порядка;

- измерено распределение интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве и получены параметры ближнего порядка Каули и статических искажений для тех же состояний образцов, для которых измерено $g(\mu_0)$, свидетельствующих о появлении в α -сплавах Cu-Al и Ag-Al неоднородного порядка. На примере сплавов Cu-17 ат.% Al и Ag-13,7 ат.% Al, примыкающих к границе распада, изучена структура неоднородностей в широкой температурной области. Показано, что строение этих неоднородностей зависит от термообработки и соответствует структурам упорядоченных длиннопериодных или интерметаллических фаз, которые наблюдаются при более высоких концентрациях и температурах;

- показано, что аномальное поведение плотности электронных состояний при изменении концентрации и обработки высококонцентрационных сплавов обусловлено неоднородным упорядочением;

- изучено влияние электронного облучения на изменение остаточного электросопротивления ρ и параметров ближнего порядка при изохронном и изотермическом отжигах для образцов с разным исходным состоянием. Показано, что облучение не приводит к возникновению областей с новыми типами ближнего порядка, которые не наблюдались бы в необлученных сплавах Cu-Al, Ag-Al. В то же время облучение содействует процессам перехода к более равновесному при низких температурах состоянию упорядочения, которое обычно не достигается даже при длительных низкотемпературных отжигах. Указанное позволяет прогнозировать возможные структурно-фазовые превращения, т.е. радиационную стойкость материалов при длительном облучении;

- в методе когерентного потенциала при использовании модели однозонного приближения получены теоретические выражения для плотности электронных состояний при наличии в сплавах межатомных парных корреляций и дальнего порядка. В разных моделях электронных спектров и при подстановке экспериментальных параметров ближнего порядка выполнены теоретические расчеты энергетической зависимости плотности состояний, которые подтверждают предположение, выдвинутое из анализа экспериментальных результатов об уменьшении вблизи уровня Ферми плотности состояний при упорядочении. Концентрационная зависимость $g_{T=0P}(\mu_0)$ хорошо согласуется с экспериментальной при учете в $\langle I \rangle$ матрице многократного рассеяния на парах атомов. Наличие провала в плотности состояний, смещенного к краю зоны, наблюдается также для сплавов Ni-Mo при описании электронного спектра d-зоны через структурнозависимое выражение;

- в борновском приближении теории псевдопотенциалов получены выражения для остаточного электросопротивления и его вкладов, обусловленных ближним порядком и статическими искажениями, а также проведен их расчет для сплавов Fe-Al, Cu-Al, Ag-Al с использованием модельных псевдопотенциалов Хейне - Абаренкова - Анималу и экспериментальных значений параметров ближнего порядка и статических искажений. Проведено сопоставление $\rho_{\text{исп}}$ и $\rho_{T=0P}$ для разных состояний ближнего порядка, из которых следует, что только при подгонке валентностей компонентов можно получить согласие их

абсолютных величин. Отмечается, что в сплавах с существенными статическими искажениями, вклад в электросопротивление размерного эффекта превышает составляющую от собственно ближнего порядка;

- в методе когерентных потенциалов получено теоретическое выражение, которое позволяет в неборновском приближении вычислить вклад в остаточное электросопротивление сплавов ближнего и дальнего порядка, обусловленный как релаксацией затухания электронов проводимости, так и изменением плотности электронных состояний при упорядочении. Как в приближении слабой, так и сильной связи для сплавов Cu-Al, Ag-Al, Ni-Mo выполнены расчеты зависимости сопротивления от положения уровня Ферми и показано его аномальное поведение, которое связано с повышением электросопротивления при увеличении степени ближнего порядка, если уровень Ферми попадает в область провала плотности состояний, что согласуется с экспериментальным поведением сопротивления при упорядочении для сплавов на основе переходных металлов, в частности Ni - Mo. Теоретический расчет концентрационной зависимости электросопротивления согласуется с экспериментальной зависимостью $\rho(C)$ только для сплавов Ni - Mo;

- разработана методика расчета поправочного множителя к фактору поглощения при произвольной ориентации образца и абсолютизации интенсивности в методе диффузного рассеяния при использовании жесткого излучения;

- создана оригинальная рентгеновская низкотемпературная приставка для монокристаллов, которая используется для отделения однофононного теплового диффузного рассеяния в сплавах при наличии в них ближнего порядка и статических искажений с привлечением разностной низкотемпературной методики;

- экспериментально и теоретически исследована двухфононная компонента рассеяния для молибдена и сплава Ni-11,8 ат.% Mo, при вычислении которой, как показано, необходимо учитывать квантовую добавку в энергии фононов;

- измерена интенсивность диффузного рассеяния в зависимости от волнового вектора \vec{K} для продольной и поперечной мод колебаний в разных направлениях при нескольких температурах, а также дисперсионные зависимости $\chi(\vec{K})$ для разных ветвей колебаний в молибдене и сплав Ni - 11,8 ат.% Mo;

- изучены коновские особенности для дисперсионных кривых в

молибдене;

- теоретически в модели Борна-Бегби проведен расчет $\nu(\mathbf{K})$ для симметричных и несимметричных направлений и проведен анализ важности ограничений, вытекающих из нарушений трансляционной симметрии в сплавах для сплавов Ni-Mo. Рассмотрена ориентация векторов поляризации по отношению к вектору \mathbf{K} для разных направлений во всем интервале волновых векторов до границы зоны Бриллюэна;

- определены континуальные характеристики упругих свойств для сплава Ni - 11,8 ат.% Mo при экспериментальном и теоретическом анализе кривых $\nu(\mathbf{K})$;

- проведен расчет плотности состояния фононов сплава Ni - 11,8 ат.% Mo при использовании экспериментальных значений упругих постоянных и теории Борна-Бегби в приближении нецентрального взаимодействия ближайших соседей;

- изучено распределение интенсивности диффузного рассеяния в неприводимой области обратного пространства и объемах, связанных с ней правилами симметрии, характерными для модуляций диффузного рассеяния межатомными корреляциями. Проведено отделение компонент рассеяния, обусловленных ближним порядком и размерным эффектом и получены их параметры, свидетельствующие о неоднородном упорядочении для отожженного состояния сплава Ni-11,8 ат.% Mo;

- в одноосной модели диагонального беспорядка разработана теория частично упорядоченных сплавов и получены выражения свободной энергии для сплавов со статическими межатомными корреляциями (ближним и дальним порядком), а также для равновесных значений параметров ближнего порядка. Проведен расчет параметров ближнего порядка $\alpha_1 + \alpha_2$ для сплавов Cu-Al, Ag-Al и Ni-Mo для однородных состояний упорядочения, а также температурной зависимости параметра дальнего порядка η и α_4 .

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что ее результаты проливают свет на одну из наиболее важных фундаментальных проблем физики твердого тела - природу межатомных взаимодействий и, следовательно, объясняют фазовую нестабильность твердых растворов при изменении их состава и внешних воздействий, дают возможность предсказать возникновение в твердых растворах неоднородного ближнего порядка и тем самым прогнозировать влияние субтонкой структуры на физические характеристики неупорядоченных,

частично упорядоченных и многофазных систем.

Разработанные новые методы исследований в монокристаллах позволяют с большой достоверностью изучать динамику решетки, упругие постоянные, плотность фононных состояний и строение ближнего порядка для различных систем с использованием широкого спектра излучений.

Результаты диссертации включены в курсы лекций, читаемых в Киевском университете, методические разработки по лабораторным работам.

Основные положения, выносимые на защиту

1. При образовании в твердых растворах на основе благородных металлов ближнего порядка плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми $g(\mu_0)$ уменьшается. На изменение $g(\mu_0)$ при упорядочении существенную роль оказывает образование в α -сплавах, упорядоченных по $L1_2$ -типу, концентрационных неоднородностей с другим типом ближнего порядка, вклад которых в плотность состояний может иметь разный знак в зависимости от их типа.

2. Увеличение остаточного электросопротивления при повышении степени ближнего упорядочения в твердых растворах на основе переходных металлов обусловлено не только вкладом релаксационного затухания электронов проводимости, но и уменьшением плотности электронных затуханий вблизи уровня Ферми.

3. Низкотемпературный разностный метод изучения динамики решетки, упругих постоянных и плотности фононных состояний для твердых растворов с ближним порядком при использовании жесткого излучения и учете угловой зависимости фактора поглощения при определении и абсолютизации диффузного рассеяния рентгеновских лучей. В твердых растворах Ni-Mo упругие свойства изменяются несущественно по сравнению с никелем.

4. Метод расчета свободной энергии сплавов с учетом статистических межатомных корреляций (ближнего и дальнего порядка). Равновесный ближний порядок в твердых растворах устанавливается как результат появления провалов плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми.

В диссертации сформулированы и обоснованы научные положения и выводы, совокупность которых представляет собой экспериментальную и теоретическую основу для развития перспективного направления в

физике сплавов, позволяющего прогнозировать влияние субтонких эффектов структуры неидеальных кристаллов на различные физические свойства.

Апробация работы. Основные результаты диссертации были доложены на V, VI, VII Всесоюзных совещаниях по упорядочению атомов и его влиянию на свойства сплавов (г.Томск,1976, г.Киев,1979, г.Свердловск,1983); II, III, IV, V Всесоюзных конференциях по радиационным эффектам в металлах и сплавах (г.Алма-Ата,1980, 1983,1986, г.Самарканд,1991); V Всесоюзном совещании по применению ускорителей заряженных частиц в народном хозяйстве (г.Ленинград,1985); Республиканской конференции по проблемам физики прочности и пластичности (г.Душанбе,1985); VIII Совещании по использованию рассеяния нейтронов в физике твердого тела (г.Юрмала,1985); III Всесоюзном симпозиуме по применению сталей и сплавов в криогенной технике (г.Батуми,1986); I Всесоюзной научно-технической конференции по прикладной рентгенографии металлов (г.Ленинград,1986); Семинаре "Физико-технологические проблемы поверхности металлов"(г.Алма-Ата,1986); Всесоюзном совещании по планарным дефектам в упорядоченных сплавах и интерметаллидах (г.Барнаул,1987); Международной конференции по физике переходных металлов (г.Киев,1988); XVI Всесоюзном совещании по физике низких температур (г.Ленинград,1988); Всесоюзном совещании по физике износостойкости поверхности металлов (г.Алма-Ата,1988); Всесоюзной конференции по проблемам исследования структуры аморфных металлических сплавов (г.Москва, 1988); I Всесоюзной конференции по модификации свойств конструкционных материалов пучками заряженных частиц (г.Томск,1988); Всесоюзной конференции по физике дефектов поверхностных слоев материалов (г.Ленинград,1989); XVII Европейской кристаллографической конференции (г.Москва,1989); 7 и 8-я Межотраслевой школе по физике радиационных явлений и радиационных технологий (г.Алушта,1989,1991); 9-ом Межотраслевом совещании по физике радиационных повреждений твердого тела (г.Харьков,1989); XVII Бакурчанской школе по радиационной физике металлов и сплавов (г.Бакуриани,1990); Межреспубликанской научно-технической конференции по качеству и надежности ударов трения (г.Мельник,1992).

Публикации. Основные результаты диссертационной работы изложены в 82 научных статьях, включая 1 авторское свидетельство.

Список основных работ приведен в конце автореферата. В работах, написанных в соавторстве, автору принадлежат результаты, изложенные в диссертации.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, пяти глав (каждая из которых содержит выводы), основных результатов и выводов, приложения, списка литературы. Общий объем диссертации составляет 401 машинописную страницу, включая 275 страниц основного текста, 82 рисунка и 20 таблиц и содержит список цитируемой литературы из 393 наименований на 48 страницах.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснованы актуальность выбранного направления исследований, сформулированы цель и новизна работы, основные положения, выносимые на защиту, научная и практическая ценность полученных результатов.

В первой главе с привлечением экспериментальных методов низкотемпературной электронной теплоемкости, диффузного рассеяния рентгеновских лучей, остаточного электросопротивления проведены комплексные исследования строения ближнего порядка и эффективной плотности электронных состояний $g(\mu_0)$ на уровне Ферми в твердых растворах замещения Cu-Al, Ag-Al при различных состояниях упорядочения, создаваемых термомеханической обработкой и электронным облучением.

Известно, что концентрационная зависимость плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми для исследуемых сплавов немонотонна. Такое поведение $g(\mu_0) = f(C)$ до сих пор не нашло объяснения. Поскольку указанные сплавы склонны к образованию ближнего порядка, то было высказано предположение, что эти аномалии связаны с ближним упорядочением.

Для определения плотности электронных состояний был использован метод низкотемпературной калориметрии, позволяющий определить низкотемпературную электронную теплоемкость C_e , которая связана с эффективной плотностью состояний g на уровне Ферми $g(\mu_0)$ следующим соотношением

$$C_e = \pi^2/3 k_B^2 T g^{\text{эфф}}(\mu_0), \quad (1)$$

Исследования проводились для сплавов Cu-Al, содержащих 8,10, 12,15 и 17 ат. % и Ag-Al с концентрацией 4,10,15 и 18,7 ат. % алюминия. Состояния ближнего порядка были заданы разными видами обработки, в частности деформацией, отжигом при высоких температурах с последующим медленным охлаждением и закалкой от разных температур, а также электронным облучением.

Термообработка образцов проводилась либо в атмосфере инертного газа либо в высоком вакууме в специально сконструированных установках. Измерения теплоемкости были выполнены в интервале температур 1,4-7 К на стенде, используя адиабатный криостат комбинированного погруженно-анероидного типа. Ошибка измерения C_p не превышала 1,5%. Температурные зависимости $C_p/T=f(T^2)$ для всех обработок в обоих сплавах имеют линейный вид. Концентрационные зависимости плотности электронных состояний $g(\mu_0)=f(C)$, для различных структурных состояний в области твердых растворов Cu-Al и Ag-Al приведены на рис.1.

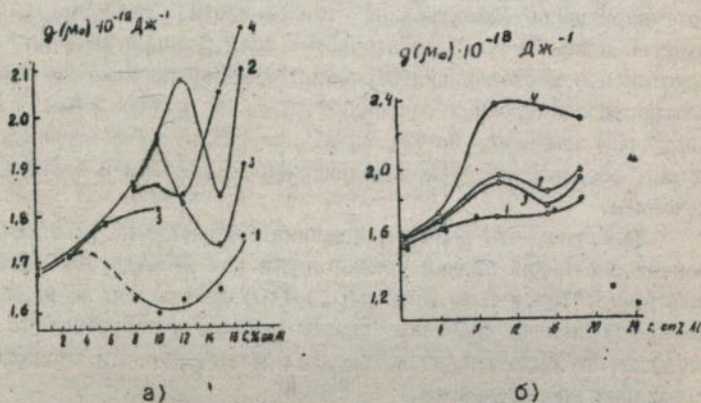


Рис.1. Плотность электронных состояний на уровне ферми в зависимости от концентрации алюминия для различных состояний ближнего порядка в сплавах:
 а) Cu-Al: 1 - для отожженного; 2 - деформированного; 3 - закаленного от 500; 4 - от 650°C; б - закаленного массивного образца.
 б) Ag-Al: 1 - отожженного; 2 - закаленного из α -области; 3 - закаленного из двухфазной области; 4 - деформированного. Литературные данные: • - α -фаза; ▲ - β' -фаза; ■ - γ -фаза

Видно, что при малых концентрациях (до 6 ат.%) алюминия, где ближнее упорядочение несущественно, имеет место линейный рост $g(\rho_0)$, кривая Б. При дальнейшем увеличении концентрации алюминия $g(\rho_0)$ проходит через максимум, затем через минимум, после чего снова наблюдается рост плотности состояний, такое изменение $g(\rho_0)$ характерно для всех обработок. Однако величина и положение максимума и минимума определяется исходным состоянием сплавов.

Для сплавов Ag-Al кривые $g(\rho_0)=f(C)$ также являются сложными, причем, как и для сплавов Cu-Al, наименьшее значение плотности состояний получено для отожженного состояния, а для деформированного имеют место максимальные значения $g(\rho_0)$. Уменьшение плотности состояний наибольшее для сплава Ag-10 ат.% Al и достигает более 40%. Однако наблюдается и отличие кривой $g(\rho_0)=f(C)$ по сравнению со сплавом Cu-Al для отожженного состояния. В области малых концентраций для этого состояния отсутствует максимум $g(\rho_0)$.

В работе было выдвинуто предположение, что сложное изменение концентрационных зависимостей $g(\rho_0)$ для различных состояний исследуемых сплавов обусловлено наличием и трансформацией в твердых растворах ближнего порядка, строение которого определялось путем изучения распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве и вычисления параметров ближнего порядка Каули.

После вычитания дополнительных компонент диффузного рассеяния, интенсивность $I(k)$, связанная с ближним порядком и статическими искажениями, и выраженная в абсолютных электронных единицах, может быть представлена через параметры Каули α_i и статические искажения a_q и a_q^2 следующим соотношением:

$$N(k) = \frac{I(k)}{C_A C_B (f_A - f_B)} - 1 = \sum_{i=1} z_i \alpha_i \frac{\sin kr_i}{kr_i} - a_q D(k) + a_q^2 E(k) \quad (2)$$

Здесь f_A , f_B , C_A и C_B - функции атомного рассеяния и концентрация компонент А и В, соответственно, z_i , r_i , k - координационное число, радиус-вектор i -той координационной сферы, модуль вектора обратного пространства, соответственно.

Экспериментальные исследования показали, что распределение интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей для сплавов

всех состояний, включая и деформированные, характеризуются наличием диффузных максимумов, расположенных в местах сверхструктурных отражений сверхструктуры $L1_2$. Это свидетельствует о том, что твердые растворы Ag-Al и Cu-Al характеризуются, в основном, ближним порядком, прототипом которого является сверхструктура $L1_2$. Об этом свидетельствует также чередование знаков параметров ближнего порядка, приведенных в табл.1, для указанных сплавов (Cu-Al для двух координационных сфер, Ag-Al — четырех). Величины этих максимумов, как и параметров ближнего порядка, зависят от концентрации в сплаве алюминия и обработки.

Тщательные исследования изменения распределения интенсивности диффузного рассеяния и параметров ближнего порядка при изменении концентрации в сплаве алюминия и температуры сплавов, а также электронном облучении свидетельствует о том, что ближний порядок в сплавах Cu-Al и Ag-Al в широкой области концентраций неоднороден, причем тип корреляций в областях неоднородности при изменении температуры и концентрации сплава может изменяться.

Строение ближнего порядка неоднородных областей в широкой области температур изучалось на сплавах Cu-17 ат.% Al и Ag-18,7 ат.% Al, примыкающих к границе распада. Оказалось, что эти области в сплавах Cu-Al при высоких температурах упорядочены по типу γ_2 -фазы (Cr_3Al_4) и при низких температурах — по типу длиннопериодической α_2 -фазы, а для сплавов Ag-Al — по типу γ - и β' -фазы, соответственно, при высоких и низких температурах.

Начальный рост $g(\mu_0)$ связан с увеличением числа электронов на атом и не зависит от обработки. Начиная с концентрации 8-12 ат.% Al, для упорядоченных или частично упорядоченных сплавов появится вклад в $g(\mu_0)$ за счет образования ближнего порядка.

Ближний порядок уменьшает плотность состояний, причем величина этого эффекта, как это видно из рис.1, превосходит рост $g(\mu_0)$ за счет легирования. Поэтому плотность состояний, пройдя через максимум будет уменьшаться. Положение и величина максимума определяется обработкой, поскольку деформацией и закалкой степень упорядочения и концентрацию начала образования ближнего порядка можно существенно изменять.

Для освоенных сплавов Ag-Al максимум на кривой $g(\mu_0)=f(C)$ отсутствует (кривая 1, рис.1 б). На наш взгляд это объясняется тем, что в отожженных α -сплавах Ag-Al ближний порядок даже для

Таблица 1

Параметры ближнего порядка и статических искажений для различных состояний сплавов Cu-Al и Ag-Al

Концентрация сплава и его обработка	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
Cu - 12 ат. % Al						
Деформация	0,068	-0,199	0,112	-0,041	-0,051	0,039
Отжиг	-0,148	0,154	0,024	-0,071		
Зак. 500°C	-0,110	0,068	0,065	-0,063		
Зак. 650°C	-0,121	0,070	0,073	-0,065		
Cu - 17 ат. % Al						
Деформация	0,067	-0,188	0,086	-0,074	-0,067	0,053
Отжиг	-0,217	0,305	0,094	-0,111		
Зак. 500°C	-0,209	0,198	0,099	-0,120		
Зак. 650°C	-0,226	0,294	0,113	-0,138		
Ag - 10 ат. % Al						
Деф. 20	-0,04	0,05	-0,02	0,10	-0,10	0,110
Деф. + 800	-0,08	0,16	-0,04	0,16	-0,17	0,006
Отжиг 300	-0,10	0,17	-0,07	0,17	-0,15	0,005
200	-0,10	0,18	-0,07	0,18	-0,14	0,006
Отжиг 20	-0,10	0,14	-0,02	0,08	-0,12	0,005
Ag - 15 ат. % Al						
Деф. 20	-0,05	0,11	-0,03	0,05	-0,20	0,15
Деф. + 800	-0,07	0,20	-0,06	0,12	-0,09	0,07
отжиг 300	-0,10	0,27	-0,10	0,20	-0,12	0,08
200	-0,09	0,18	-0,08	0,19	-0,12	0,08
Отжиг 20	-0,10	0,10	-0,08	0,12	-0,10	0,07

сравнительно малых концентрация алюминия неоднороден. Для сплавов Ag-Al в отличие от сплавов Cu-Al кривая распада α -фазы характеризуется малым наклоном (граница распада при 200°C приходится на конц. сплава 7 ат. % Al). Поэтому при низкотемпературном отжиге сплавов следует ожидать образования β' -фазы.

Электронная теплоемкость β' -фазы ниже, чем α -фазы. Казалось бы, что это обусловит еще большее падение $g(\mu_0)$. Однако это не так. При используемых термообработках β' -фаза не образуется. Более того, она в заметном количестве не образовывалась даже тогда, когда закаленный от 750°C сплав Ag-15 ат.% Al отжигался при 150°C в продолжение 40 ч. Неоднородности, о которых идет речь, образуются на базе ГЦК решетки α -твердого раствора, имеют чрезвычайно малые размеры и по характеру распределения атомов на малых расстояниях отвечают структуре β' -фазы. Наличие неоднородностей с другим типом ближнего порядка обуславливает уменьшение эффективных параметров порядка, и, следовательно, увеличение плотности состояний. Если же сплавы закалить от температур выше α - β' -перехода, то тогда такой максимум на кривой $g(\mu_0)=f(C)$ должен появиться, что и наблюдается на эксперименте (кривые 2,3, рис.1б).

При приближении к границе распада, независимо от исходного состояния сплавов, плотность состояний возрастает. Основной причиной этого является расслоение α -твердого раствора, упорядоченного по $L1_2$ типу, и образование в нем либо низкотемпературных β' -фазы для сплавов Ag-Al и α_2 -фазы для Cu-Al, либо областей, упорядоченных по типу высокотемпературных γ -фазы для Ag-Al сплавов и γ_2 -фазы для сплавов Cu-Al. Прогнозировать изменение плотности электронных состояний при термообработке таких сплавов затруднительно, поскольку вклады от различных упорядоченных областей могут изменяться не только по абсолютному значению, но и по знаку (например, для сплавов Ag-Al фазовый переход $\alpha \rightarrow \beta'$ сопровождается уменьшением электронной теплоемкости, а переход $\alpha \rightarrow \gamma$ ее ростом). Однако, судя по тому, что переход от двухфазной низкотемпературной структуры (отожженные сплавы) к промежуточным структурам (закаленные сплавы) и затем к максимально разупорядоченным в наших условиях структурам (деформированные сплавы) сопровождается последовательным на каждом этапе ростом $g(\mu_0)$, основной вклад в изменение плотности электронных состояний вносит ближнее упорядочение.

Как видно из предыдущего, макроскопически однофазные твердые растворы уже при малых концентрациях легирующего элемента характеризуются неоднородностями, строение ближнего порядка которых соответствует высококонцентрационным фазам. Размеры этих областей и совершенство их строения определяется обработкой. Очевидно, при

длительной эксплуатации изделий из таких сплавов в условиях внешних воздействий, способствующих диффузионным процессам (облучение, нагрев и др.), структурно-фазовое состояние, а следовательно, физические и механические характеристики сплавов будут изменяться. Для получения окончательного ответа требуются длительные времена испытаний. Однако их поведение можно прогнозировать на результатах исследований строения ближнего порядка.

В связи с этим особый интерес вызывает изучение воздействия электронного облучения на строение ближнего порядка, поскольку дефекты, введенные облучением, как известно, влияют как на термодинамику, так и кинетику упорядочения, и по мнению многих исследователей могут не только стимулировать, но и вызывать структурно-фазовые превращения в твердых растворах. Изучение зависимости остаточного электросопротивления ρ при изохронном и изотермическом отжиге для сплавов Cu-Al и Ag-Al с 15 ат. % алюминия при разных исходных состояниях ближнего порядка, определение параметров ближнего порядка для образцов, прошедших ту же обработку и подвергнутых облучению электронами с энергией 1,6 МэВ, при флюэнсе $5 \cdot 10^{17}$ - 10^{18} эл/см² и потоке $5 \cdot 10^{12}$ эл/см²·с показывает, что характер поведения ρ , углового распределения интенсивности диффузного рассеяния, чередование знаков параметров ближнего порядка для облученных и необлученных состояний отожженных и закаленных образцов остается одинаковым.

Таким образом, электронное облучение не приводит к возникновению принципиально новой сверхтонкой структуры твердых сплавов Cu-Al и Ag-Al по сравнению с необлученными образцами.

С другой стороны, при облучении имеет место сильное уменьшение α_1 и α_2 и падение остаточного электросопротивления как для отожженного, так и закаленного образцов для сплавов. Температура изохронного отжига, при которой $|\alpha_1|$ и ρ достигают своего максимального значения после облучения смещена в область более высоких температур, хотя их величины ниже, чем для необлученных образцов. Это свидетельствует о том, что облучение в значительной степени стабилизирует низкотемпературный тип ближнего порядка, благодаря радиационно-стимулированной диффузии, которая способствует установлению более равновесного состояния порядка, которое не может быть достигнуто при обычном низкотемпературном отжиге.

Таким образом, изучение ближнего порядка и электронной струк-

туры для поликристаллических бинарных твердых растворов Cu-Al и Ag-Al показывает, что поведение параметров ближнего порядка, плотности электронных состояний, остаточного электросопротивления имеют сложный характер, однако хорошо вписываются в схему зарождения и преобразования неоднородного ближнего порядка.

Во второй главе, используя метод когерентных потенциалов проведен теоретический анализ изменения плотности электронных состояний при наличии в сплавах дальнего и ближнего порядка и выполнен расчет $g(\mu_0)$ для конкретных состояний ближнего порядка в различных моделях дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$ для сплавов Cu-Al, Ag-Al и Ni-Mo.

В данной работе использовалась теория, в которой за нулевое приближение при описании сплава выбрана эффективная среда, т.е. он может быть описан в приближении когерентного потенциала. Точный расчет рассеяния на парах и более атомов проводится как результат введения поправок к приближению когерентного потенциала. При этом оказалось возможным введение параметра малости γ , в соответствии с которым можно было оценить сходимость T-матрицы рассеяния на парах и большем количестве атомов.

Выражение для $g(\mu_0)$ при выходе за одноузельное приближение было получено в теории многократного рассеяния в модели диагонального беспорядка.

Известно, что плотность электронных состояний, приходящихся на один атом связана с усредненной функцией Грина $\langle G \rangle$ следующим соотношением

$$g(E) = - \frac{1}{\pi \nu N} \text{Im Sp} \langle G \rangle, \quad (3)$$

где ν - число подрешеток, N - число атомов в подрешетке.

Тогда в рассматриваемой теории получим

$$g(E) = g_0(E) + \delta g_0(E) + \delta g(E), \quad (4)$$

где

$$g_0(E) = - \frac{2}{\pi \nu} \text{Im} \sum G_{00}^{11}. \quad (5)$$

и представляет основной вклад в $g(E)$, соответствующий одноузельному приближению функции Грина. Дополнительный вклад $\delta g_0(E)$ обуслов-

лен многократным рассеянием на паре независимых атомов, а $\delta g(E)$ описывает вклад, связанный с ближним и дальним порядком

$$\delta g_0(E) = -\frac{2}{\pi \nu} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{l, (jm) \neq (10)} (A_m^{lj})^{-1} x_l x_j y_l y_j a_m^{lj} a_{-m}^{lj} \times \right. \\ \times \left\{ [(x_l - y_l) + x_l y_l (x_j - y_j) a_m^{lj} a_{-m}^{lj}] a_m^{lj} a_{-m}^{lj} (\tau_{1b} - \tau_{1a}) (\tilde{G}_{\infty}^{2z})_{\infty}^{lj} + \right. \\ \left. \left. + [1 - x_l x_j y_l y_j (a_m^{lj} a_{-m}^{lj})^2] a_m^{lj} (\tau_{2b} - \tau_{2a}) (\tilde{G}_{\infty}^{2z})_{\infty}^{lj} \right\} \right\} \quad (6)$$

$$\delta g(E) = -\frac{2}{\pi \nu} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{l, (jm) \neq (10)} (A_m^{lj})^{-1} E_m^{lj} \times \right. \\ \times \left\{ [(x_l - y_l) + x_l y_l (x_j - y_j) a_m^{lj} a_{-m}^{lj}] (\tau_{1b} - \tau_{1a}) (\tilde{G}_{\infty}^{2z})_{\infty}^{lj} + \right. \\ \left. \left. + [1 - x_l x_j y_l y_j (a_m^{lj} a_{-m}^{lj})^2] a_m^{lj} (\tau_{2b} - \tau_{2a}) (\tilde{G}_{\infty}^{2z})_{\infty}^{lj} \right\} \right\} \quad (7)$$

При отсутствии дальнего порядка выражение для $g(E)$ можно упростить, ограничившись лишь суммированием по индексам узлов n и m . Тогда

$$g_0(E) = -\frac{2}{\pi N} \operatorname{Sp} \operatorname{Im} \sum_n \tilde{G}_{nm} \quad (8)$$

$$\delta g_0(E) = -\frac{2}{\pi N} \operatorname{Sp} \operatorname{Im} (xy)^2 \sum_{n, m \neq n}$$

$$\frac{A_{nm}^2 \{ [1 - xy A_{nm}^2] A_{nm} (\tilde{G}^z)_{nm} + [x-y] A_{nm}^2 (\tilde{G}^z)_{nn} \}}{[1 - x^2 A_{nm}^2][1 - y^2 A_{nm}^2][1 + xy A_{nm}^2]} \quad (9)$$

$$\delta g(E) = -\frac{2}{\pi N} \operatorname{Sp} \operatorname{Im} (xy) \sum_{n, m \neq n}$$

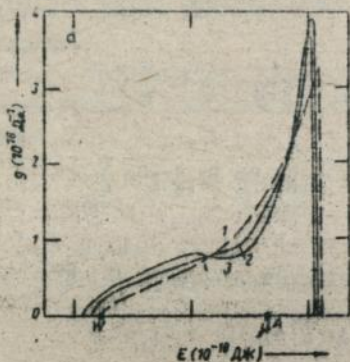
$$\frac{\alpha_{nm}((1-xy)A_{nm}^2(\tilde{G}^z)_{mn} + (x-y)A_{nm}^2(\tilde{G}^z)_{nn})}{(1-x^2A_{nm}^2)(1-y^2A_{nm}^2)(1+xyA_{nm}^2)} \quad (10)$$

$$A_{nm} = \tilde{G}_{nm}(t_B - t_A); \quad A_{nm}^z = A_{nm}A_{mn}; \quad t_A = (\nu_A - \sigma) / [1 - (\nu_A - \sigma)\tilde{G}_{nn}].$$

Для исследования влияния ближнего порядка на плотность электронных состояний бинарных неупорядоченных сплавов Cu-Al и Ag-Al в рамках однозонной модели использовались модельные представления о дисперсионной зависимости энергии $\epsilon(k)$, в частности модели Ведыева и свободных электронов.

На рис.2 видно, что для сплавов с ближним порядком, в отличие от состояния с хаотическим распределением атомов, вблизи уровня Ферми наблюдается провал плотности электронных состояний, глубина которого возрастает с повышением степени упорядочения. Расчет концентрационной зависимости плотности состояний и сопоставление ее с экспериментальными значениями на уровне Ферми дает хорошее согла-

Рис.2. Плотность электронных состояний для s -зоны сплавов Cu - Al, вычисленная по модели Ведыева и экспериментально измеренным параметрам ближнего порядка:
 1 - разупорядоченное состояние ($\alpha_s=0$);
 2 - упорядоченное (отожненное) состояние для 10; 3 - 17 ат.% Al;
 μ_A и W - уровень и ширина зоны для Cu



сие при использовании параметров ближнего порядка как минимум для трех, четырех координационных сфер и учета многократного рассеяния на парах. Аналогичные результаты получены также для сплавов Ag-Al, что подтверждает возможность пренебрежения s - d гибридизацией при расчете плотности состояний для этих сплавов.

При использовании модели свободных электронов для описания d -зоны в сплавах Cu-Al и Ag-Al также имеет место провал $g(\mu_0)$. Однако при сохранении качественного характера концентрационной зависимости $g(\mu_0)$ согласие экспериментальных и теоретических значений ухудшается по сравнению с случаем, когда используется модель Ведяева, что объясняется меньшей пригодностью приближения когерентных потенциалов к моделям слабой связи.

Расчет плотности электронных состояний для сплава Ni-Mo проводился при положительном параметре рассеяния δ в приближении закона дисперсии, учитывающем анизотропию энергии для различных направлений вектора \mathbf{k} в d -зоне, что предполагает при вычислении матричных элементов функции Грина переход к суммированию, который проводился в неприводимой части зоны Бриллюэна.

На кривой $g(E)$ вблизи края d -зоны в месте положения уровня Ферми также наблюдается провал. Показано, что уменьшение $g(E)$ совпадает со щелью, которая имеет место при наличии дальнего порядка.

Таким образом, теоретические исследования поведения $g(\mu_0)$ подтверждают выдвинутое ранее предположение об уменьшении плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми при наличии в твердых растворах ближнего порядка.

В третьей главе экспериментально и теоретически методами псевдопотенциалов и когерентных потенциалов изучено влияние ближнего порядка на остаточное электросопротивление сплавов и дано объяснение возрастанию электросопротивления при повышении степени ближнего упорядочения в сплавах на основе переходных металлов.

В Борновском приближении рассеяние электронов проводимости, не учитывающем изменение плотности электронных состояний, при использовании модели упругого изотропного континуума с привлечением модельных псевдопотенциалов Хейне-Анималу-Абаренкова выражение для остаточного электросопротивления для сплавов с ближним порядком и статическими искажениями можно представить через сумму соответствующих вкладов

$$\rho = \rho_n + \rho_{bn} + \rho_{лрн} + \rho_{крн} \quad (11)$$

где ρ_n - нордзимовский член; ρ_{bn} - электросопротивление, обусловленное ближним порядком; $\rho_{лрн}$, $\rho_{крн}$ - электросопро-

тивление за счет линейного и квадратичного размерного эффекта, соответственно.

В работе проведено сравнение между экспериментальными значениями электросопротивления, полученными при изохронном и изотермическом отжиге твердых растворов Fe-Al, Cu-Al, Ag-Al с различными исходными состояниями ближнего порядка и теоретическими, вычисленными с использованием полученных параметров α_1 , α_1' , α_1'' , для одних и тех же состояний упорядочения.

Следует заметить, что для всех сплавов подгоночным параметром теории выбиралась валентность компонентов. Вклад от статических искажений для сплавов с заметным размерным эффектом существенно превышает величину электросопротивления, обусловленную ближним порядком, в случае же малых локальных искажений, как для сплава Cu-Al, вклады $\rho_{\text{бп}}$ и $\rho_{\text{лрв}} + \rho_{\text{крв}}$ сопоставимы между собой. Для всех сплавов сохраняется общая тенденция влияния ближнего порядка на остаточное электросопротивление, которое состоит в том, что вклад межатомных корреляций обусловлен всем спектром их параметров.

Для учета влияния на остаточное электросопротивление не только времени релаксации затухания одноэлектронных состояний, но и изменения энергетического спектра, его расчет проведен в неборновском приближении с использованием метода когерентного потенциала для однозонной модели. Тогда тензор статической электропроводности для сплавов с ближним порядком может быть выражен через двухчастичную функцию Грина в следующем виде

$$\sigma_{\text{стат}} = \frac{e^2 \hbar}{4\pi N \Omega} \operatorname{Re} \left\{ \sum_n \left[\vartheta_{\alpha}(\tilde{\alpha}^- - \tilde{\alpha}^+) \vartheta_{\alpha}(\tilde{\alpha}^- - G^+) \right]_{00} + 4xy(t_B - t_A) \sum_{m \neq 0} (A_m)^{-1} \cdot \right. \\ \cdot (\alpha_m + xy a_{0m}^2) \left\{ [1 - xy a_{0m}^2] a_{0m} [\tilde{\alpha}^+ \vartheta_{\alpha} [\tilde{\alpha}^- - \tilde{\alpha}^+] \vartheta_{\alpha} \tilde{\alpha}^+]_{0m} + (x-y) a_{0m}^2 \cdot \right. \\ \left. \left. [\vartheta_{\alpha}(\tilde{\alpha}^- - \tilde{\alpha}^+) \vartheta_{\alpha}(\tilde{\alpha}^- - G^+)]_{00} \right\} + 2xy(t_B - t_A) \sum_{m \neq 0} (A_m)^{-1} (\alpha_m + xy a_{0m}^2) \cdot \right. \\ \cdot (1 - xy a_{0m}^2) [\tilde{\alpha}^+ \vartheta_{\alpha} \tilde{\alpha}^+]_{0m} [\tilde{\alpha}^- \vartheta_{\alpha} \tilde{\alpha}^-]_{0m} - 4xy(t_B - t_A)^2 \cdot \\ \left. \cdot \sum_{m \neq 0} (A_m)^{-1} (\alpha_m + xy a_{0m}^2) (1 - xy a_{0m}^2) a_{0m} [\tilde{\alpha}^+ \vartheta_{\alpha} [\tilde{\alpha}^- - \tilde{\alpha}^+] \vartheta_{\alpha} \tilde{\alpha}^+]_{0m} \right.$$

$m \neq 0$

$$\left[\tilde{G}^{-1} - \tilde{G}_m \tilde{G}^* \right]_{om} (\alpha_{om} + \alpha_{om}^*)^{-1} \Big|_{E=\mu_0} \quad (12)$$

$$\text{где } \tilde{G}_{\vec{k}, \alpha} = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \vec{\epsilon}_{\vec{k}}}{\partial k_x} \right], \quad \tilde{G}^{\pm} = \tilde{G}(E^{\pm})$$

На рис.3 приведена теоретическая зависимость остаточного электросопротивления от положения уровня Ферми для сплава Ag-15 ат.% Al.

Для вычисления остаточного электросопротивления в сплавах Cu-Al и Ag-Al использовались модели свободных электронов и Вейля, а также экспериментальные значения параметров ближнего порядка α_1 . Для обеих моделей зависимость $\rho(\mu_0)$ оказалась аналогичной и характеризуется аномальным поведением электросопротивления, если уровень Ферми попадает в провал плотности электронных состояний. Превышение теоретических значений электросопротивления для упорядоченных состояний по сравнению с разупорядоченными не

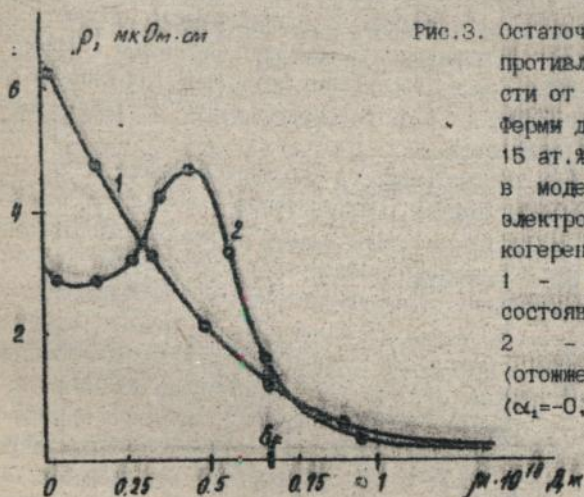


Рис.3. Остаточное электросопротивление в зависимости от положения уровня Ферми для сплава Ag - 15 ат.% Al, вычисленное в модели свободных электронов приближения когерентных потенциалов: 1 - разупорядоченное состояние ($\alpha_1=0$); 2 - упорядоченное (отожненное) состояние ($\alpha_1=-0,10$)

согласуется с экспериментом, из которого следует, что при повышении степени упорядочения величина остаточного электросопротивления для сплавов Cu-Al и Ag-Al, наоборот, уменьшается.

Таким образом, модель диагонального беспорядка, в которой рассматриваются электроны лишь z -зоны, не может быть использована для исследуемых сплавов при расчете ρ . Для этих сплавов оказывается более приемлемой теория псевдопотенциалов, учитывающая вклады рассеяние электронов многих зон.

В связи с этим представляло интерес теоретическое исследование остаточного электросопротивления для сплавов Ni-Mo с 11,8; 14; 16 ат. % молибдена, для которых подавляющий вклад в электросопротивление должна вносить локализованная d -зона. Исследования изохронной зависимости остаточного электросопротивления для деформированного, закаленного и отожженного состояний показывает, что при ближнем упорядочении ρ возрастает.

Вычисления в приближении сильной связи $\rho(\mu_0)$, как и для сплавов Cu-Al и Ag-Al, свидетельствует, что в случае когда уровень Ферми попадает в провал кривой $g(\mu_0)$ наблюдается его аномальный рост при повышении степени упорядочения, что имеет место на эксперименте и подтверждается для всех исследуемых концентраций сплавов.

Таким образом, теория остаточного электросопротивления, основанная на однозонном приближении с привлечением параметров, описываемых d -зону, правильно описывает основной эффект, свойственный сплавам на основе переходных металлов, для которых на эксперименте наблюдается рост электросопротивления с увеличением степени ближнего упорядочения.

В четвертой главе рассматриваются экспериментальные и теоретические методы учета поглощения рентгеновских лучей при произвольных наклонах и поворотах монокристаллических образцов, абсолютизации интенсивности при коллимации диффузного рассеяния с использованием жесткого излучения, отделения теплового однофононного и многофононного вкладов, изучения дисперсионных и упругих характеристик неупорядоченных сплавов для корректного выделения интенсивности, обусловленной ближним порядком и статическими искажениями и вычисления параметров ближнего упорядочения и размерного эффекта.

В работе показано, что при использовании жесткого излучения, которое позволяет расширить объем обратного пространства и упростить отделение флуоресцентного и комптоновского рассеяния, в методе диффузного рассеяния рентгеновских лучей рассеивающий объем образца изменяется при наклонах на угол χ и поворотах на угол θ .

поэтому следует правильно учитывать поглощение рентгеновских лучей. Его учет можно проводить путем введения поправочного множителя $I(\alpha, \beta, \gamma, \epsilon)$ к фактору поглощения $S/2\mu$. В общем случае $I(\alpha, \beta, \gamma, \epsilon)$ сложным образом зависит от углов χ , Θ , геометрии падающего и отраженного лучей и толщины кристалла.

В частных случаях поправочный множитель упрощается.

Оказывается, что в случае сильного поглощения $I(\alpha, \beta, \gamma, \epsilon)$ не зависит от наклона образца до некоторого предельного значения $\chi_{гр}$. При $\chi > \chi_{гр}$ для малых и больших Θ интенсивность резко снижается. Для слабопоглощающих кристаллов, в частности для аморфного кварца, который обычно используется для абсолютизации рентгеновских лучей, зависимость I от χ и Θ достаточно сложная и приводит к увеличению интенсивности рассеяния на больших углах, которые используются при абсолютизации.

Для отделения однофононной компоненты теплового диффузного рассеяния были созданы оригинальные низкотемпературные приставки для монокристаллов, охлаждение образцов в которых проводится либо с помощью термобатарей до -80°C (возможен нагрев до 50°C), либо пропусканием паров азота, что позволяло получать произвольную температуру образца в интервале $-188+20^\circ\text{C}$. При этом конструкция позволяла осуществлять практически произвольные повороты образца относительно трех взаимноперпендикулярных осей и вследствие откачки воздуха из объема вокруг образца пренебречь рассеянием на воздухе.

Показано, что при расчете двухфононной составляющей при низких температурах в энергии фононов необходимо учитывать рассеяние на нулевых колебаниях в отличие от обычно используемого дебаевского приближения $E=kT$. Интенсивность двухфононного рассеяния растет с увеличением вектора S/λ , быстрее чем однофононное и комптоновское рассеяние. Установлено для некоторых симметричных направлений наличие коновских особенностей в молибдене.

Значения упругих характеристик кристаллической решетки в сплавах, как и в чистых металлах, могут быть получены путем отделения однофононной части рассеяния на тепловых колебаниях атомов с последующим нахождением динамической матрицы, что обычно осуществляют в гармоническом приближении Борновской теории колебаний. Однако наличие в сплавах ближнего порядка и статических искажений затрудняют получение однофононной компоненты. В связи с этим в

данной работе предлагается метод отделения однофононного теплового диффузного рассеяния от других физических факторов рассеяния путем измерения интенсивности диффузного рассеяния при разных температурах.

Разность интенсивностей диффузного рассеяния $\Delta I_i(T_1, T_2)$, измеренных при разных температурах T_1 и T_2 , где T_1 выбирается в интервале $-185 \pm 80^\circ\text{C}$, а T_2 - обычно комнатная, в L -той точке обратного пространства содержит только температурно зависимую часть диффузного рассеяния. Поскольку разности двухфононной и многофононной компонент могут быть легко определены, то разностная составляющая однофононного рассеяния для трех J -тых мод имеет вид

$$\Delta I_i^{(1)}(T_1, T_2) = \frac{\bar{f}_i^2}{\bar{m}} \left| \frac{\vec{S}_i}{\lambda} \right|^2 \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{E_{i,j}(T_1)}{\nu_{i,j}^2} \exp[-2M_i(T_1)] - \frac{E_{i,j}(T_2)}{\nu_{i,j}^2} \exp[-2M_i(T_2)] \right\} \cos^2 \left[\frac{\vec{S}_i}{\lambda} \cdot \vec{U}_{ij} \right] \quad (13)$$

где $\bar{f} = C_A f_A + C_B f_B$, $\bar{m} = C_A m_A + C_B m_B$ - средние значения функции атомного рассеяния и атомной массы.

Система уравнений для $\Delta I_i^{(1)}$ включает направляющие косинусы дифракционного вектора \vec{S}/λ и тройки векторов поляризации \vec{U}_{ij} , которые могут быть определены через углы поворота Эйлера (α, β, γ) через матрицу поворота $A(\alpha, \beta, \gamma)$.

Динамика решетки изучалась для сплава Ni-11,8 ат. % Mo и были определены дисперсионные кривые $\nu(\vec{K})$ как для высокосимметричных, так и произвольных направлений в обратном пространстве.

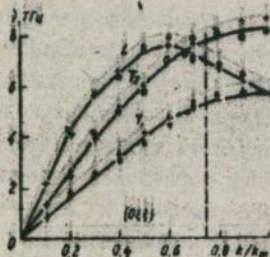


Рис. 4. Дисперсионные кривые сплава Ni-11,8 ат. % Mo для направления $[0\xi\xi]$ ($\bullet, \circ, \triangle$ - экспериментальные значения $\nu_L, \nu_{T_1}, \nu_{T_2}$, соответственно; - - - теоретические; - - - граница зоны Бриллюэна.

На рис. 4 приведены дисперсионные зависимости для одного из направлений для продольной L и двух поперечных мод T_1 и T_2 . Характер изменения $\nu(\vec{K})$ и абсолютные значения частот аналогичен их поведению и величине для чистого никеля, хотя наблюдается более существенное размягчение продольной ветви колебаний вблизи границы зоны Бриллюэна. Упругие постоянные для сплава Ni-Mo с близким порядком были определены при использовании полученных дисперсионных зависимостей путем решения секулярного уравнения

$$| D_{ij}(\vec{K}) - 4\pi^2\nu^2(\vec{K})\delta_{ij} | = 0, \quad (14)$$

где D_{ij} в соответствии с теорией Борна-Бегби определяются через упругие постоянные C_{11} , C_{12} и C_{44} . Они оказались равными $C_{11}=242$, $C_{12}=158$, $C_{44}=104$ ГПа, тогда как для чистого никеля $C_{11}=239$, $C_{12}=158$, $C_{44}=108$ ГПа. Воспользовавшись этими значениями, а также величинами, полученными из наклонов $\nu(\vec{K})$ при $k \rightarrow 0$ можно вычислить компоненты характеристической матрицы для любых точек обратного пространства и рассчитать дисперсионные зависимости для произвольных направлений в обратной решетке. В таблице 2 приведены частоты и углы ориентации векторов поляризации относительно вектора \vec{K} для произвольно выбранного несимметричного направления $[014]$ в плоскости обратного пространства $(011)^*$ вблизи границы зоны Бриллюэна. Даны как экспериментальные, так и теоретические значения, полученные в приближении Борна-Бегби.

Видно, что для несимметричных направлений можно выделить моды с большими и меньшими значениями частот, т.е. условно продольные и поперечные волны. С приближением к границе зоны Бриллюэна наблюдается отличие между теоретическими и экспериментальными значениями и заметное отклонение векторов поляризации от векторов направлений \vec{K} . При $k/k_m=1,0$ векторы поляризации ориентированы относительно \vec{K} перпендикулярно.

Определив из динамических характеристик сплавов упругие постоянные и воссоздав дисперсионные зависимости для произвольных направлений, можно рассчитать для сплавов фоннные спектры, что имеет ряд преимуществ перед традиционными методами их получения.

На рис. 5 приведены расчетные значения плотности состояний фононов для чистого никеля и сплава Ni-11,8 ат. % Mo. Здесь же представлены экспериментальные результаты, полученные в безмодельном восстановлении $g(\nu)$ по исследованию неупругого когерентного рас-

Таблица 2

Экспериментальные и теоретические дисперсионные зависимости и углы ориентации векторов поляризации Θ для несимметричных направлений [014] в сплаве Ni-11,8% ат. Мо вблизи границы зоны Бриллюэна

k/k_m	ν_1 , ГГц	$\nu_1^{Б-Б}$, ГГц	ν_2 , ГГц	$\nu_2^{Б-Б}$, ГГц	Θ°	$\Theta^{Б-Б}$
[014]						
0,80	8,3	8,4	5,4	5,5	0	3
0,85	8,5	8,5	5,6	5,7	4	5
0,90	8,2	8,6	5,7	5,8	8	8
0,95	8,1	8,6	5,8	5,9	10	11
1,0	8,5	8,6	5,8	5,9	14	14

сеяния тепловых нейтронов для никеля. Видно, что положения максимумов, а также их относительные величины хорошо согласуются между

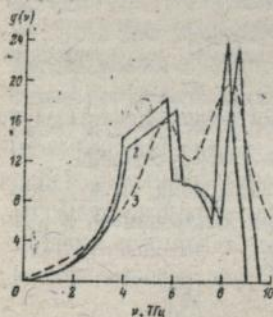


Рис. 5. Плотность состояний фононов сплава Ni - 11,8 ат.% Мо (1) и чистого Ni(2,3)

собой. Однако формы кривых существенно отличаются. Кроме того, для сплава наблюдается некоторое смещение обоих пиков в сторону меньших частот.

Таким образом, оригинальная разностная низкотемпературная методика позволяет для неупорядоченных систем провести корректное отделение однофононной компоненты диффузного рассеяния без чего невозможно правильно выделить рассеяние, обусловленное ближним по-

рядком и локальными статическими искажениями в сплавах и, следовательно, изучить их строение.

В работе выполнены исследования по изучению строения ближнего порядка для одной из наиболее интересных систем Ni-Mo, которая характеризуется наличием диффузных максимумов в положениях $(1\ 1/2\ 0)$ в то время как сверхструктурные отражения упорядоченных соединений Ni₃Mo ($D1_2$), имеющих место в этих сплавах, соответствует положениям $1/5(420)$, поэтому объяснение ближнего порядка как преобладания состояния с дальним порядком не является очевидным. Тщательные исследования субтонкой структуры в этих сплавах проводились только электронномикроскопическими методами, поэтому не могли дать количественных параметров для объяснения строения ближнего порядка и являются противоречивыми.

Определение параметров ближнего порядка и статических искажений было проведено для монокристаллического сплава Ni-11,8 ат. % Mo в отожженном состоянии. Распределение интенсивности диффузного рассеяния после отделения рассеяния на тепловых колебаниях приведенные на рис. 6, свидетельствует о наличии диффузных максимумов в положениях $(1\ 1/2\ 0)$ и вытянуты в направлении $[001]$ и $[011]$, т.е. к положениям сверхструктурных узлов β -фазы.

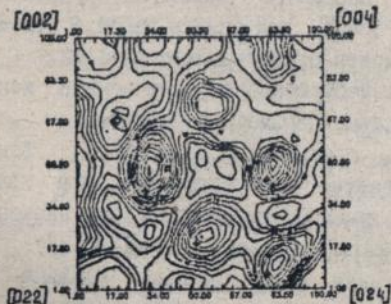


Рис. 6. Распределение интенсивности диффузного рассеяния в плоскости (001) для сплава Ni - 11,8 ат. % Mo в упорядоченном (отожженном) состоянии

Расчет параметров ближнего порядка α_{lmn} и статических искажений $\epsilon_{lmn}^{\lambda_1 \lambda_2}$ для 13-и координационных сфер проводился, используя соотношение

$$\begin{aligned}
 I_{\text{бп-сн}} = & N C_A C_B (f_A - f_B)^2 + N \sum_{\substack{l, m, n \\ l+m+n \neq 0}}^{\infty} \left\{ (C_A^2 + C_A C_B \alpha_{lmn}) f_A^2 \cdot \right. \\
 & \cdot \cos \pi [h_1 \ell (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AA}})] \cos \pi [h_2 m (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AA}})] \cos \pi [h_3 n (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AA}})] + \\
 & + 2 C_A C_B (1 - \alpha_{lmn}) f_A f_B \cos \pi [h_1 \ell (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AB}})] \cos \pi [h_2 m (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AB}})] \cdot \\
 & \cdot \cos \pi [h_3 n (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{AB}})] + (C_B^2 + C_A C_B \alpha_{lmn} f_B^2 \cos \pi [h_1 \ell (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{BB}})] \\
 & \cdot \cos \pi [h_2 m (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{BB}})] \cos \pi [h_3 n (1 + \varepsilon_{lmn}^{\text{BB}})] - \\
 & \left. - (C_A f_A + C_B f_B)^2 \cos \pi h_1 \ell \cos \pi h_2 m \cosh \pi n \right\} \quad (15)
 \end{aligned}$$

где

$$\varepsilon_{lmn}^{\text{AA}} = -1/2 \left[\left(\frac{1}{C_B (1 - \alpha_{lmn})} - 1 \right) \varepsilon_{lmn}^{\text{AB}} + \left(\frac{1}{C_A (1 - \alpha_{lmn})} - 1 \right) \varepsilon_{lmn}^{\text{BB}} \right].$$

В таблице 3 приведены параметры ближнего порядка α_{lmn} и статических искажений $\varepsilon_{lmn}^{\text{AA}}$, $\varepsilon_{lmn}^{\text{BB}}$ для сплава Ni-11,8 ат. % Mo с учетом ослабления интенсивности структурных отражений.

Для отдаленных сфер пренебрежение геометрическими искажениями приводит к отличию даже в знаке параметров порядка.

Видно, что параметр α_2 превышает значение α_1 (аналогично параметр α_3 также оказывается выше других). При этом не наблюдается соответствия полученных параметров их значениям для сверхструктуры $D1_8$ (параметры приведены в скобках). Отличие относится не только к величинам, но и к знакам. Сложный характер изменения параметров α_i свидетельствует о неоднородности ближнего порядка, поэтому его строение не может быть описано только в модели концентрационных волн или микродоменов с планарными дефектами. Совместный анализ поведения параметров ближнего порядка, зависимости остаточного электросопротивления при изохронном отжиге для сплавов Ni-Mo с 11,8, 14 и 18 ат. % молибдена показывает, что отожженное состояние исследуемого сплава

описывается ближним порядком типа Ni_4Mo ($D1_a$), хотя заметное превышение α_2 указывает на существенную неоднородность ближнего порядка этого типа.

При увеличении температуры отжига происходит падение электро-сопротивления, связанное с разрушением ближнего порядка типа $D1_a$ и его превращением в высокотемпературный ближний порядок, типа DC_{22} , который описывается диффузными пиками (1 1/2 0). С возрастанием

Таблица 3

Параметры ближнего порядка α_1 и статических искажений $\epsilon_1^{\lambda_1 \lambda_2}$ для различных узлов сплава $Ni - 11,8$ ат. % Mo без учета и с учетом влияния размерного эффекта на интенсивность структурных отражений.

Номер коорд сферы	Индексом узла 1, л, л	Без учета размерного эффекта			С учетом размерного эффекта		
		α_1	$\epsilon_1^{\lambda_1 \lambda_2} \cdot 10^2$	$\epsilon_1^{\mu \mu} \cdot 10^2$	α_1	$\epsilon_1^{\lambda_1 \lambda_2} \cdot 10^2$	$\epsilon_1^{\mu \mu} \cdot 10^2$
1	2	3	4	5	6	7	8
1	011	-0,0798	-0,1165	-3,291	-0,0815	-0,088	-0,012
	101	(-1/4)	-0,1898	-4,128		-0,121	-0,098
	110		-0,1269	-6,091		-0,119	-0,186
2	002	0,3132	0,0986	2,698	0,3248	0,085	0,071
	020	(1/8)	-0,1061	0,389		-0,094	0,047
	200		0,8901	-8,690		1,338	-9,932
3	112	-0,0199	-0,022	-1,184	-0,0188	0,008	-0,004
	121	(1/8)	-0,025	-1,075		0,005	0,004
	211		-0,0537	-1,858		-0,019	-0,0002
4	022	0,0553	-0,048	0,018	0,0282	-0,012	0,002
	202	(-1/4)	-0,030	0,194		-0,098	0,041
	220		0,0598	-0,458		0,072	-0,029

степени ближнего порядка этого типа, остаточное электросопротивление, как следует из однозонных представлений в методе когерентного потенциала, возрастает.

В пятой главе представлена теория сплавов с дальним и ближним порядком, разработанная в приближении когерентного потенциала, в частности получено выражение для свободной энергии и

выполнен расчет параметров ближнего и дальнего порядка в сплавах Cu-Al, Ag-Al и Ni-Mo.

Существующие феноменологические теории упорядочения не учитывают роль межатомных корреляций, вклад от которых в твердых растворах является определяющим для отдельных физических свойств и может существенно влиять на термодинамические параметры неидеальных кристаллов. Имеющиеся электронные и статистические теории не позволяют установить физические причины, определяющие ближний порядок. Более того предложенные теории оказываются непригодными для частично упорядоченных сплавов, характеризующихся одновременно дальним и ближним порядком, хотя их вклады при плохо выраженном дальнем порядке могут быть сопоставимы.

В данной работе на основе общих принципов равновесной термодинамики сплавов с использованием полученных ранее выражений для плотности состояний при выходе за одноузельное приближение создана микроскопическая электронная теория для частично упорядоченных сплавов.

Для определения равновесных значений параметров ближнего и дальнего порядка выражение для свободной энергии F , удобное для численных расчетов, можно представить

$$F(V, T, \mu, \epsilon_{nm}^{ij}, \eta) = \mu \langle N_e \rangle + \Omega_e(V, T, \mu, \epsilon_{nm}^{ij}, \eta) - TS_e(\epsilon_{nm}^{ij}, \eta), \quad (16)$$

в котором термодинамический потенциал электронной подсистемы Ω_e определяется через плотность электронных состояний $g(E)$, а конфигурационная часть энтропии S_e через параметры межатомных корреляций и дальнего порядка, N_e - число электронов проводимости.

Равновесные значения параметров межатомных корреляций можно получить из следующего условия

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{nm}^{ij}} \right|_{V, T, N_e} = 0 \quad (17)$$

Равновесные значения параметров ближнего порядка Каули α_{nm} могут быть вычислены, воспользовавшись соотношением

$$\alpha_{nm} = \left(1 - \alpha_{nm}\right)^2 \left[\exp \left[\frac{\nu}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon, \mu) \cdot N'_i(\epsilon) d\epsilon \right] - 1 \right] \quad (18)$$

где

$$N'_i(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} \frac{\partial g_i(\epsilon')}{\partial \epsilon_{nm}^{(i)}} d\epsilon'$$

Равновесным значениям параметров корреляции α_{nm} будут соответствовать такие равновесные параметры дальнего порядка η , при которых свободная энергия F принимает минимальное значение.

В таблице 4 приведены теоретические параметры ближнего порядка для сплавов Ni-Mo.

Таблица 4

Теоретические параметры ближнего порядка для сплавов Ni - Mo

Концентрация примеси, ат. % Mo	Равновесные значения			
	α_1	α_2	α_3	α_4
11,8	-0,11	0,09	0,03	-0,02
14	-0,17	0,12	0,09	-0,05
18	-0,22	0,15	0,12	-0,09

Полученные параметры хорошо согласуются с экспериментальными значениями, хотя естественно, не передают наблюдаемых неоднородностей в строении ближнего порядка. Можно заметить, что согласие теоретических и экспериментальных значений α_i для сплавов Ni-Mo лучше, чем для сплавов Cu-Al и Ag-Al, что по-видимому, объясняется лучшей адекватностью однозонной модели реальному энергетическому спектру для сплавов на основе переходных металлов.

Построение зависимостей η и α_i от температуры для Ni₄Mo позволяет определить температуру фазового перехода $T_1 \sim 1000^\circ\text{C}$, которая хорошо согласуется с температурой, вытекающей из диаграммы состояний и равной 879°C .

Таким образом, разработанная микроскопическая теория частично

упорядоченных сплавов позволяет получить хорошее согласие ⁴⁰ между теоретическими и экспериментальными параметрами субтонкой структуры, что подтверждает выдвинутое предположение о том, что физической причиной появления ближнего и дальнего порядка для сплавов Cu-Al, Ag-Al и Ni-Mo является наличие провала или образования щели в области положения уровня Ферми для плотности электронных состояний.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом низкотемпературной калориметрии изучено изменение плотности электронных состояний на уровне Ферми $g(\mu_0)$ при ближнем упорядочении твердых растворов замещения Cu-Al и Ag-Al в широкой области концентраций. Показано, что при ближнем упорядочении плотность состояний уменьшается, достигая в некоторых случаях величины до 40%, что значительно больше, чем при фазовых переходах. Концентрационные зависимости плотности состояний $g(\mu_0) = f(C)$ немонотонны и характеризуются наличием максимума, положение и величина которого зависят от термической и механической обработки сплавов.

2. Для сплавов Cu-Al и Ag-Al и тех же обработок, при которых измерялась плотность состояний $g(\mu_0)$, изучено распределение интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей и получены параметры ближнего порядка α и статических искажений α_1 и α_2^2 . Показано, что в α -твердых растворах, упорядоченных по $L1_2$ -типу, имеются концентрационные неоднородности, тип ближнего порядка которых соответствует структурам фаз, существующих в более высококонцентрационных областях. Для сплавов Cu-Al это области с ближним порядком типа длиннопериодной упорядоченной α_2 -фазы или γ_2 -фазы (Cu_3Al_4), а для Ag-Al - неоднородности, ближнее упорядочение в которых соответствует β' и γ -фазам. Тип и степень упорядочения, размеры и объем неоднородностей определяется температурой и концентрацией сплавов.

3. Немонотонный характер концентрационной зависимости $g(\mu_0)$ сплавов объясняется как результат совместного влияния изменения числа электронов проводимости на атом, однородного и неоднородного ближнего упорядочения. Величины этих вкладов определяются концентрацией сплава и обработкой. Вклад в плотность состояний электронов, обусловленный неоднородными областями, изменяется не только по абсолютному значению, но, в зависимости от типа упорядочения, и по знаку.

4. Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей и остаточного электросопротивления изучено влияние электронного облучения на характер ближнего упорядочения и его последующее изменение при изохронном и изотермическом отжигах. Показано, что облучение не изменяет характера упорядочения сплавов, однако стимулирует процессы упорядочения, позволяя получить при низких температурах состояния, которые не достигаются даже при длительных отжигах. Изучая процессы ближнего упорядочения сплавов можно прогнозировать возможные структурно-фазовые превращения, обусловленные облучением с большим флюенсом при различных температурах, т.е. радиационную стойкость материалов.

5. В однозонной модели диагонального беспорядка при выходе за одноузельное приближение методом когерентного потенциала получены выражения для плотности электронных состояний с учетом межатомных парных корреляций и параметров дальнего порядка. Показано, что независимо от выбора вида электронного спектра $\epsilon(k)$ ближний порядок приводит к появлению на кривой энергетической зависимости плотности состояний в месте образования щели плотности состояний при дальнейшем упорядочении провала, который увеличивается с ростом степени ближнего порядка. Рассчитанные концентрационные зависимости $g(\mu_0) = f(C)$ с использованием экспериментально измеренных параметров ближнего порядка для сплавов Cu-Al и Ag-Al с удовлетворительной точностью совпадает с экспериментальными результатами.

6. Получены выражения и проведен расчет изменения остаточного электросопротивления ρ бинарных сплавов при ближнем упорядочении с использованием экспериментально измеренных параметров ближнего порядка в теории модельных псевдопотенциалов и приближении когерентных потенциалов.

Расчет ρ для сплавов Cu-Al, Ag-Al и Fe-Al, основанный на привлечении модельных псевдопотенциалов, при соответствующем выборе валентности компонент сплавов дает удовлетворительно совпадающие с экспериментом результаты. Этим методом также рассчитаны вклады, обусловленные ближним упорядочением и размерным эффектом, свидетельствующие о заметной роли последнего.

Расчеты ρ методом когерентных потенциалов как в приближении слабой (для сплавов Cu-Al и Ag-Al), так и сильной связи (Ni-Mo) показывают, что при ближнем упорядочении, если уровень Ферми попадает в область провала кривой плотности состояний, остаточное

электросопротивление должно возрасти. На эксперименте такой эффект наблюдается только для сплавов на основе переходных металлов.

7. Созданы оригинальные рентгеновские низкотемпературные приставки для монокристаллов и получены выражения для учета поправочного множителя к фактору поглощения в методе диффузного рассеяния монокристаллов при использовании жесткого излучения, что позволило использовать разностную низкотемпературную методику для исследования однофононного теплового диффузного рассеяния в широком объеме обратного пространства в сплавах с ближним порядком и статическими искажениями и правильно осуществить абсолютизацию излучения.

8. Изучены дисперсионные зависимости $\nu(\vec{k})$ и ориентации векторов поляризации $\vec{U}_j(\vec{k})$ упругих волн для молибдена и сплава Ni - 11,8 ат. % Mo с ближним порядком, как в симметричных, так и несимметричных направлениях, которые хорошо описываются в приближении нецентрального взаимодействия теории Борна-Бегби. Проведен расчет плотности фононных состояний для сплава, свидетельствующий о смещении ее низко- и высокотемпературных пиков без существенного изменения их формы по сравнению с частотным спектром $g(\nu)$ для никеля.

9. Экспериментально изучено распределение интенсивности диффузного рассеяния в неприводимых объемах обратного пространства, связанных между собой определенными правилами симметрии для монокристаллического сплава Ni-11,8 ат. % Mo.

Получены вклады в интенсивность диффузного рассеяния от ближнего порядка и статических искажений и рассчитаны параметры ближнего порядка α_1 и размерного эффекта ϵ_1 для многих координационных сфер. Чередование знаков α_1 на нескольких сферах указывает на то, что медленное охлаждение сплава приводит к образованию ближнего порядка $D1_a$ -типа. Наблюдается заметное превышение параметра α_2 над максимально возможным при дальнем порядке, что свидетельствует о неоднородности ближнего порядка, т.е. существовании в сплаве двух типов ближнего порядка $-D0_{22}(1\ 1/2\ 0)$ и $D1_a(1/5(420))$. Полученные результаты подтверждаются температурной зависимостью остаточного электросопротивления при изохронном отжиге.

10. Получены теоретические выражения для свободной энергии сплавов с ближним и дальним порядком, а также для параметров

межатомных корреляций в приближении когерентных потенциалов. Имеет место удовлетворительное согласие между теоретическими и экспериментальными значениями параметров Каули α для нескольких координационных сфер в сплавах Cu-Al, Ag-Al и Ni-Mo, свидетельствующее о том, что образование ближнего порядка в твердых растворах замещения обусловлено понижением плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми. Рассчитана температура фазового перехода порядок-беспорядок для сплава Ni-Mo, которая составляет 1300 К, что удовлетворительно согласуется с ее экспериментальным значением.

Список авторских публикаций по теме диссертации

1. Куличенко В.П., Кулиш Н.П., Петренко П.В. Исследование процессов восстановления электросопротивления и объема после пластической деформации в сплаве Fe-16 ат.% Al // ФММ. - 1971. - 32, N 1. - С. 109-113.
2. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В. Исследование ближнего порядка в сплаве Fe-16,3 ат.% Al // ФММ. - 1973. - 36, N 1. - С. 207-209.
3. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Радченко И.Н. Локальное упорядочение и процессы восстановления электросопротивления в сплаве Fe-20 ат.% Al // ФММ. - 1974. - 37, N 6. - С. 930-932.
4. Куличенко В.П., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Радченко И.Н. Исследование ближнего порядка и его влияние на остаточное электросопротивление в сплаве Fe-12 ат.% Al // ФММ. - 1975. - 40, N 3. - С. 581-586.
5. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Радченко И.Н. Ближний порядок в низкоконцентрационных железо-алюминиевых сплавах // ФММ. - 1976. - 41, N 1. - С. 125-129.
6. Давидовский В.М., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П. Расчет температурной зависимости остаточного электросопротивления сплавов железо-алюминий методом модельного псевдопотенциала // Уфж. - 1976. - 21, N 1. - С. 153-154.
7. Давидовский В.М., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П. Исследование остаточного электросопротивления бинарных сплавов железо-алюминий. Расчет методом модельного псевдопотенциала // ФММ. - 1978. - 41, N 3. - С. 478-480.
8. Давидовский В.М., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П. Вклад статических искажений решетки в остаточное электросопротивление сплавов железо-алюминий // ФММ. - 1979. - 42, N 3. - С. 498-500.
9. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Татаров А.А. Ближний порядок в α -твердом растворе Cu-Al // В кн.: Упорядочение атомов и свойства сплавов. Киев, 1979. - С. 125-127.
10. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П. Влияние ближнего порядка и размерного эффекта на остаточное электросопротивление сплава Cu-16 ат.% Al // ДАН УССР, серия "А". - 1979. - N 8. - С. 876-879.
11. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В. Исследование остаточного электросопротивления в α -твердых растворах медь-алюминий // ФММ. - 1979. - 42, N 3. - С. 489-495.

12. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В. Влияние низко-температурной пластической деформации и последующего отжига на остаточное электросопротивление сплавов Cu-Al // Металлофизика. - 1980. - 2, N 3. - С. 75-80.

13. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П. Расчет вклада ближнего порядка и статических искажений в остаточное электросопротивление сплавов Cu-Al методом псевдотензиала // УМН. - 1980. - 25, N 4. - С. 541-545.

14. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Татаров А.А. Исследование ближнего порядка в α -твердом растворе медь-алюминий методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей // ФММ. - 1980. - 50, N 1. - С. 113-122.

15. Кулиш Н.П., Мандрыка В.М., Петренко П.В. Изучение механизма ближнего упорядочения в низкоконцентрационных сплавах железо-алюминия методом внутреннего трения // ФММ. - 1981. - 51, N 6. - С. 1229-1237.

16. Зубченко В.С., Петренко П.В., Татаров А.А. Кинетика упорядочения сплава Ag-15 ат.% Al // Металлофизика. - 1983. - 5, N 3. - С. 117-119.

17. Кулиш Н.П., Пакчанин Л.М., Петренко П.В., Пилипчук Ю.Л., Репецкий С.П. Влияние ближнего порядка на теплоемкость низкоконцентрационных сплавов Fe-Al в области температур 1,5-6 K // Металлофизика. - 1983. - 5, N 6. - С. 105-107.

18. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Татаров А.А. Температурная зависимость параметров ближнего порядка в сплаве Cu-15 ат.% Al // ДАН УССР, серия "А". - 1983. - N 8. - С. 78-81.

19. Зубченко В.С., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Татаров А.А. Характер упорядочения в сплавах Cu-Al // Металлофизика. - 1983. - 5, N 5. - С. 58-63.

20. Гришкевич А.Л., Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г., Цыганов Н.Л. Учет двухфононного диффузного рассеяния при низкотемпературной рентгенографии металлов // Сб. Прикладная рентгенография металлов. Ленинград, 1985. - С. 108.

21. Грабовский Ю.Е., Давидовский В.М., Мельникова Н.А., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Татаров А.А. Остаточное электросопротивление двойных твердых растворов при термической обработке // Изв. АН СССР. - Металлы, 1987. - N 4. - С. 178-181.

22. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Мироненко А.И., Петренко П.В., Порошин В.Г., Утенкова О.В. Рентгеновская приставка для монокристаллов // А.с. 1317341 СССР. Открытия. Изобретения. - 1987. - N 22. - С. 184-185.

23. Грабовский Ю.Е., Кулиш Н.П., Пакчанин Л.М., Петренко П.В., Репецкий С.П. Аномальное изменение электронной теплоемкости твердых растворов Cu-Al при ближнем упорядочении // Металлофизика. - 1983. - 10, N 1. - С. 114-115.

24. Kulish N.P., Melnikova N.A., Pertenko P.V., Poroshin V.G., Repetsky S.P., Tsyganov N.L. Elastic constant and spectrum of thermal vibration in Ni-Mo alloys // Physics of transition metals international conference. Kiev, 1988. - P. 157.

25. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г., Репецкий С.П., Цыганов Н.Л., Стаценко В.М. Фононный спектр сплава Ni-11,8 ат.% Mo // Металлофизика. - 1989. - 11, N 1. - С. 93-96.

26. Замчук И.К., Живодуб Е.Л., Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г., Репецкий С.П., Цыганов Н.Л. Определение упругих постоянных в сплавах методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей // Зав. лаборатория. - 1989. - N 11.

- С. 76-78.

27. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г., Цыганов Н.Л. Двухфононное рассеяние с учетом нулевых колебаний атомов // Изв.вузов. Физика. - 1989. - 32, N 2. - С. 82-86.

28. Петренко П.В., Кулиш Н.П., Владимиров В.В., Грабовский Ю.Е., Гридасевич А.Л., Лызин В.В., Мельникова Н.А. Исследование упругих инструментов из твердого сплава типа ВК под воздействием электронного пучка // Сб. Физика дефектов поверхностных слоев материалов. Ленинград, 1989. - С. 185-188.

29. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г., Репецкий С.П., Засимчук И.К. Атомные колебания в сплаве Ni-11,8 ат.% Mo для произвольных мод // ФММ. - 1989. - 67, N 3. - С. 508-511.

30. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Порошин В.Г. Плотность состояний фононов в неупорядоченных твердых растворах Ni-Mo // ФТТ. - 1990. - 32, N 7. - С. 1928-1932.

31. Грабовский Ю.Е., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Цыганов Н.Л., Шатний Т.Д. Влияние ближнего порядка на плотность электронных состояний и остаточное электросопротивление бинарных сплавов // ФММ. - 1990. - N 2. - С. 199-202.

32. Грабовский Ю.Е., Кулиш Н.П., Петренко П.В., Прохоров И.М., Репецкий С.П. Изменение электронной теплоемкости α -фазы сплавов Ag-Al при термообработке // УФЖ. - 1990. - 35, N 11. - С. 1749-1751.

33. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Шатний Т.Д. Электронная структура и ближнее упорядочение бинарных сплавов // ФММ. - 1990. - N 10. - С. 51-60.

34. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Репецкий С.П., Шатний Т.Д. Влияние ближнего порядка на электронный энергетический спектр, теплоемкость и остаточное электросопротивление бинарных сплавов // ФТТ. - 1990. - 32, N 11. - С. 3185-3196.

35. Kulish N.P., Petrenko P.V. Short-range order in binary solid solutions. Ordering and its change on heating in Fe-Al, Cu-Al and Ag-Al alloys // Phys.stat.sol.(a). - 1990. - 120, N 1. - P. 315-326.

36. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Рябищук А.Л., Татаров А.А. Влияние электронного облучения на ближнее упорядочение сплавов Cu-Al и Ag-Al // ФММ. - 1990. - N 12. - С. 81-85.

37. Кулиш Н.П., Мельникова Н.А., Петренко П.В., Рябищук А.Л. Влияние электронного облучения на фазовую стабильность сплавов Cu-Al и Ag-Al // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1991. - N 3(57). - С. 39-45.

38. Kulish N.P., Petrenko P.V., Repetskii S.P., Shatnii T.D. Coherent potential method in the electronic theory of disordered alloys // Phys.stat.Sol.(b). - 1991. - 165. - P. 143-156.

39. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Прохоров И.М., Репецкий С.П., Цыганов Н.Л. Влияние ближнего порядка на плотность электронных состояний сплавов Ag-Al. // УФЖ. - 1992. - 37, N2. - С. 281-284.

40. Кулиш Н.П., Петренко П.В., Лось В.Ф., Репецкий С.П. Влияние упорядочения на энергетический спектр и электропроводность сплава // ФТТ. - 1992. - 34, N4. - С. 1160-1170.

41. Кулиш Н.П., Грабовский Ю.Е., Петренко П.В., Прохоров И.М., Репецкий С.П. Изменение электронной теплоемкости α -твердых растворов Cu-Al при ближнем упорядочении // ФММ. - 1992, N8. - С. 144-152

AB 26.825