

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Ю. А. БАГАРЯЦКИЙ

**ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ДИФфуЗНОГО РАССЕЯНИЯ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ДЛЯ СТАРЕЮЩИХ СПЛАВОВ**

(Представлено академиком И. П. Бардиным 4 I 1951)

Согласно представлениям, развитым в ⁽¹⁾, структурные изменения при естественном старении алюминиевых сплавов заключаются в образовании внутри кристаллической решетки твердого раствора областей или комплексов атомов со слегка искаженной решеткой исходного твердого раствора вследствие реализации направленных связей между атомами растворенного вещества и растворителя. Это приводит к местным нарушениям правильной периодичности в кристалле с сохранением правильной структуры всего кристалла в целом, что выражается в появлении дополнительного диффузного фона на картинах рассеяния рентгеновских лучей ^(2,3).

Предлагаемый метод расчета интенсивности этого структурного или „аномального“ диффузного рассеяния для кристаллов с нарушенной правильной периодичностью очень прост. Удобнее всего его изложить на частном примере.

Возьмем цепочку атомов с периодом a ; пусть часть атомов смещена из своих регулярных положений (рис. 1а). Воспользуемся следующим искусственным приемом: в регулярные положения цепочки, из которых сместились заштрихованные атомы, добавим сразу два атома: один с положительной рассеивающей способностью (f), а второй с отрицательной ($-f$); общее рассеяние всей цепочки от этого не изменится. Теперь мысленно разобьем такую сложную цепочку на две (рис. 1б); одна из них будет состоять из одних только „положительных“ атомов, находящихся в регулярных положениях цепочки, а вторая — из „положительных“, но смещенных атомов и „отрицательных“ несмещенных. Повторяющуюся по какому-то закону вдоль второй цепочки конфигурацию из смещенных и „отрицательных“ атомов будем называть „ошибкой“, а всю эту цепочку — „цепочкой ошибок“.

В общем случае таким же образом трехмерная решетка с нарушениями правильной периодичности может быть представлена в виде суммы двух решеток: решетки с идеальной периодичностью и решетки ошибок. Соответственно этому и амплитуда рассеяния может быть представлена как сумма двух членов: $A_{ид}$ и $A_{ош}$. Общая интенсивность рассеяния

$$I = A \cdot A^* = |A_{ид}|^2 + (A_{ид} A_{ош}^* + A_{ид}^* A_{ош}) + |A_{ош}|^2. \quad (1)$$

Кристалл в целом считается достаточно большим, поэтому $A_{ид}$ представляет собой периодическую δ -функцию и первые два члена в (1) отличны от нуля только в определенных точках дифракционного про-

странства — в узлах обратной решетки. Они определяют таким образом интенсивность рассеяния для селективных максимумов. Третий же член ($|A_{ош}|^2$) есть интенсивность диффузного рассеяния ($I_{диф}$), он представляет собой интенсивность рассеяния только решеткой ошибок.

В нашем примере каждая ошибка состоит из четырех атомов (рис. 1б): двух атомов с рассеивающей способностью f на расстоянии $a(1 + 2\xi)$ и двух атомов с рассеивающей способностью $-f$ на расстоянии a , поэтому атомно-структурный фактор каждой ошибки:

$$F(H) = 2f(H) [\cos \pi(aH) - \cos \pi(aH)(1 + 2\xi)]; \quad (2)$$

$H = (s - s_0)/\lambda$, s_0 и s — единичные векторы в направлении падающего луча и направлении наблюдения, λ — длина волны, а a — вектор трансляции в идеальной цепочке; $H(x_1, x_2, x_3)$ является радиусом-вектором пространства обратной решетки.

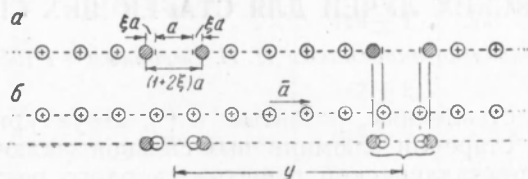


Рис. 1

Если известен закон распределения ошибок вдоль цепочки, то интенсивность рассеяния цепочкой ошибок может быть строго вычислена по методу, предложенному Мерингом⁽⁴⁾: при большом числе ошибок (M)

$$I_{диф}(H) = M |F(H)|^2 \Phi(H) = MF^2 \frac{1 - U^2}{1 + U^2 - 2U \cos^2 \psi}; \quad (3)$$

здесь U и ψ — амплитуда и фаза комплексной величины $\langle e^{2\pi i(yH)} \rangle_{cp}$, зависящей от закона распределения вероятностей для расстояний между ошибками $[p(y)]$. Наиболее простой случай — гауссово распределение

$$p(y) \sim e^{-\frac{\sigma^2}{2y_{cp}^2}(y-y_{cp})^2}; \quad (4)$$

вычисление среднего дает:

$$U = e^{-\frac{\pi^2 H^2 y_{cp}^2}{\sigma}} = e^{-\frac{\pi (aH)^2}{\sigma} L^2}; \quad \psi = 2\pi H y_{cp} = 2\pi (aH) L, \quad (5)$$

где L — среднее число периодов a между ошибками.

График функции $\Phi(H)$ для этого случая приведен на рис. 2; он напоминает кривую рассеяния для жидкостей. Первый максимум лежит в L раз ближе к нулю обратной решетки, чем первый селективный максимум; при больших H $\Phi(H) = 1$. При ином вероятностном законе $p(y)$ характер функции $\Phi(H)$ сохраняется.

Таким образом, $I_{диф}$ в области малых углов рассеяния (малых H) определяется как видом функции $|F(H)|^2$, так и существенным образом видом функции $\Phi(H)$, зависящим от закона распределения $p(y)$. При больших же углах рассеяния характер диффузного рассеяния определяется исключительно видом функции $|F(H)|^2$.

Для рассматриваемого нами примера при L порядка 10 вид функции $\Phi(H)$ вообще не будет влиять на характер $I_{диф}$, так как в области

максимумов $\Phi(H) \quad |F(H)|^2$ практически равно нулю. Таким образом, в этом случае просто $I_{\text{диф}} = M|F(H)|^2$. Это распределение изображено на рис. 3.

Приведенный пример может быть непосредственно использован для объяснения наблюдаемых при естественном старении сплавов Al—Mg эффектов аномального диффузного рассеяния. Из рис. 3 ясно, что аномальное рассеяние в сплавах, содержащих атомы одинаковой рассеивающей способности, но различной химической природы, не обязательно должно вызываться малыми областями сплава с решеткой фазы выделения, как это утверждают американские авторы (^{5, 6}); реализация химических связей в пределах исходной решетки твердого раствора и соответствующее изменение расстояний между соседними атомами уже достаточны для появления аномального рассеяния.

Метод может быть приложен также к вычислению интенсивности диффузного фона в твердых растворах замещения. Предположим, что некоторые атомы элемента А в его кристаллической решетке замещены атомами В и при этом не происходит никаких смещений атомов из регулярных положений. В этом случае ошибкой будет „положительный“ атом В и „отрицательный“ атом А, находящиеся в одной точке,— атомно-структурный фактор ошибки $F = f_B - f_A$. Если концентрация атомов В равна c , то интенсивность диффузного рассеяния, согласно

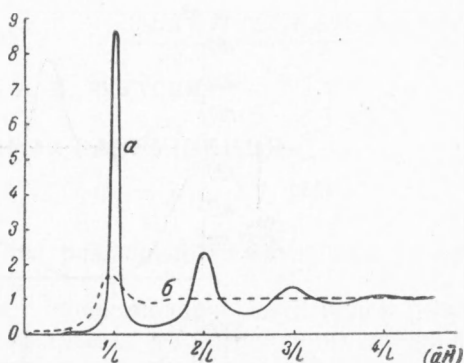


Рис. 2. График функции $\Phi(H)$ при $p(y)$ в виде гауссова распределения: a — для $\sigma = 43$ [$p(y) = 0,01 p(y_{cp})$ при $y = 0,67 y_{cp}$], $б$ — для $\sigma = 7$ [$p(y) = 0,01 p(y_{cp})$ при $y = 0,19 y_{cp}$]

(3), пропорциональна $c(f_B - f_A)^2 \Phi(H)$, т. е. интенсивность фона определяется не одним лишь ходом разности атомных факторов $(|f_A - f_B|^2)$, как у Лайуэ (⁷), а в области малых углов рассеяния Φ она зависит также от вида $\Phi(H)$. В идеальном твердом растворе должно существовать какое-то среднее, наиболее вероятное расстояние (y_{cp}) между раство-

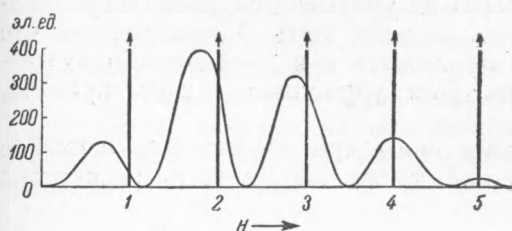


Рис. 3. $I_{\text{диф}}(H)$ в направлении a^* для цепочки рис. 1а при $\xi = -0,14$

ренными атомами, и вид функции $\Phi(H)$ должен напоминать кривую рассеяния для жидкостей, подобную изображенной на рис. 2. Поэтому интенсивность диффузного фона не должна иметь максимума при $\varphi = 0$, как в (⁷), а должна иметь максимум при $\varphi \approx \lambda/y_{cp}$ *. Это подтверждается опытными данными для сплава Au—Ag (⁹).

В качестве конкретного примера применения предлагаемого метода на рис. 4 приведено вычисленное этим методом распределение $I_{\text{диф}}(x_3)$ для сплава Al—Cu в различных предположениях о структуре сплава после старения. Кривая $б$ вычислена в предположении Гинье (^{10, 12}) и Престона (¹¹) об образовании в сплаве при естественном старении

* Этот же результат получается при учете ближнего порядка в твердых растворах (⁸).

прослойка из атомов Си в 2—3 атомных слоя (001), сопровождаемом некоторыми смещениями этих атомных плоскостей*; кривая *a* — в предположении о преобладающей роли смещений соседних плоскостей, а не больших местных концентраций атомов Си⁽¹³⁾. Соответствует опыту распределение согласно кривой *б*, причем это согласие значительно лучше, чем для кривых, рассчитанных для изолированных областей⁽¹²⁾. Кривая *в* относится к случаю появления в сплаве в областях скопления атомов Си сверхструктуры с периодом $2a$ (12). При

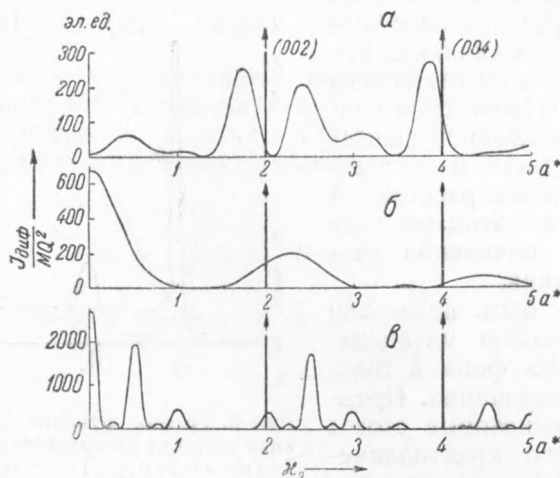


Рис. 4. Вычисленное в различных предположениях распределение $I_{\text{диф}}(H)$ вдоль направления [001] обратной решетки для сплава Al — Cu

расчете принято, что эти области имеют толщину $6a$ и что концентрация атомов Си в них соответствует составу CuAl_2 . Это распределение также значительно лучше согласуется с опытными данными.

При этих расчетах функция $\Phi(H)$ не учитывается, поскольку средние расстояния между областями должны быть большими, так что соответствующие эффекты должны лежать в непосредственной близости к нулю обратной решетки. Для упрощения расчета принято, что $f_{\text{Cu}}(H) \equiv 2f_{\text{Al}}(H)$.

Интенсивность диффузного рассеяния при образовании в сплаве малых областей с другой решеткой также может быть рассчитана предлагаемым методом.

Поступило
21 XII 1950

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Ю. А. Багаряцкий, ЖТФ, 20, 424 (1950). ² Ю. А. Багаряцкий, ЖТФ, 18, 827 (1948). ³ А. М. Елистратов, С. Д. Финкельштейн и А. И. Пашилов, ДАН, 68, № 6 (1949). ⁴ J. Mering, Acta Crystall., 2, 371 (1949). ⁵ A. H. Geisler, C. S. Barrett and R. F. Mehl, Trans. AIME, 152, 701 (1943). ⁶ A. H. Geisler and J. K. Hill, Acta Crystall., 1, 238 (1948). ⁷ M. Laue, Ann. d. Phys., 56, 497 (1918). ⁸ Ю. Н. Образцов, ЖЭТФ, 8, 593 (1938). ⁹ A. Guinier, Proc. Phys. Soc., 57, 310 (1945). ¹⁰ A. Guinier, Nature, 142, 569 (1938). ¹¹ G. D. Preston, Proc. Roy. Soc., A, 167, 526 (1938). ¹² A. Guinier, Mesures, 11, 305 (1946). ¹³ H. Jagodzinski u. F. Laves, Zs. Metallkunde, 40, 296 (1949).

* Интенсивность диффузного рассеяния в этом случае пропорциональна не только M — числу областей, но и Q^2 — квадрату числа атомов в каждой из атомных плоскостей, так как все атомы плоскости рассеивают в одной фазе. Вследствие этого диффузное рассеяние очень интенсивно и носит характер двумерной диффузии.