

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 смешена из своих регулярных положений (рис. 1a). 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. 1b); одна из них будет состоять из одних только „положительных“ атомов, находящихся в регулярных положениях цепочки, а вторая — из „положительных“, но смешенных атомов и „отрицательных“ несмешенных. Повторяющуюся по какому-то закону вдоль второй цепочки конфигурацию из смешенных 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_{ud} и $A_{oш}$. Общая интенсивность рассеяния

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

Кристалл в целом считается достаточно большим, поэтому A_{ud} 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 ($|A_{0\omega}|^2$) есть интенсивность диффузного рассеяния ($I_{\text{диф}}$), он представляет собой интенсивность рассеяния только решеткой ошибок.

В нашем примере каждая ошибка состоит из четырех атомов (рис. 1 б): 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:

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

$\mathbf{H} = (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)/\lambda$, \mathbf{s}_0 и \mathbf{s} — единичные векторы в направлении падающего луча и направлении наблюдения, λ — длина волны, а \mathbf{a} — вектор трансляции в идеальной цепочке; $\mathbf{H}(x_1, x_2, x_3)$ является радиусом-вектором пространства обратной решетки.

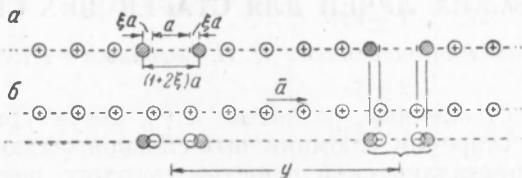


Рис. 1

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)

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

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

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

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 $\Phi(\mathbf{H})$ 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 $\Phi(\mathbf{H}) = 1$. При ином вероятностном законе $p(\mathbf{y})$ характер функции $\Phi(\mathbf{H})$ сохраняется.

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

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

максимумов $\Phi(H) \propto |F(H)|^2$ 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 применен также к вычислению интенсивности диффузного фона в твердых растворах замещения. Предположим, что некоторые атомы элемента A в его кристаллической решетке замещены атомами B и при этом не происходит никаких смещений атомов из регулярных положений. В этом случае ошибкой будет „положительный“ атом B и „отрицательный“ атом A, находящиеся в одной точке, — атомно-структурный фактор ошибки $F = f_B - f_A$. Если концентрация атомов B равна c , то интенсивность диффузного рассеяния, согласно (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 Лауз (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 растворенными 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 $\Phi = 0$, как в (7), а должна иметь максимум при $\Phi \approx \lambda / y_{cp}$. Это подтверждается опытными данными для сплава Au—Ag (8).

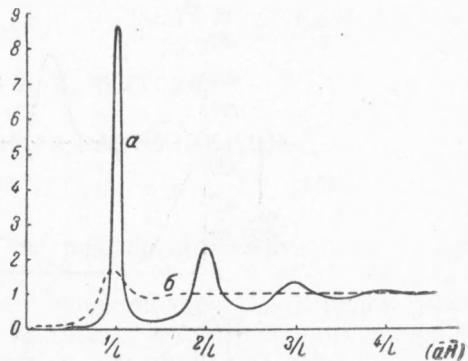


Рис. 2. График функции $\Phi(H)$ при $p(y)$ в виде гауссова распределения: a — для $\sigma = 43$ [$p(y) = 0,01 p(y_{cp})$ при $y = 0,67 y_{cp}$], b — для $\sigma = 7$ [$p(y) = 0,01 p(y_{cp})$ при $= 0,19 y_{cp}$]

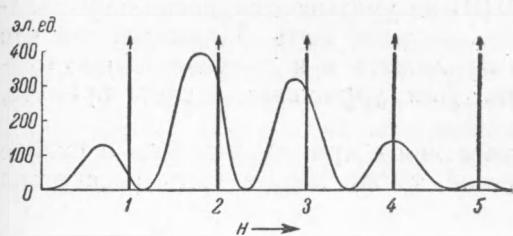


Рис. 3. $I_{\text{диф}}(H)$ в направлении a^* для цепочки рис. 1а при $\xi = -0,14$

рассеянными 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 $\Phi = 0$, как в (7), а должна иметь максимум при $\Phi \approx \lambda / y_{cp}$. Это подтверждается опытными данными для сплава Au—Ag (8).

В качестве конкретного примера применения предлагаемого метода на рис. 4 приведено вычисленное этим методом распределение $I_{\text{диф}}(H)$ для сплава Al—Cu в различных предположениях о структуре сплава после старения. Кривая b 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).

прослоек из атомов Cu 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 Cu⁽¹³⁾. Соответствует опыту распределение согласно кривой *b*, причем это согласие значительно лучше, чем для кривых, рассчитанных для изолированных областей⁽¹²⁾. Кривая *c* относится к случаю появления в сплаве в областях сортирования атомов Cu сверхструктур с периодом $2a$ ⁽¹²⁾. При

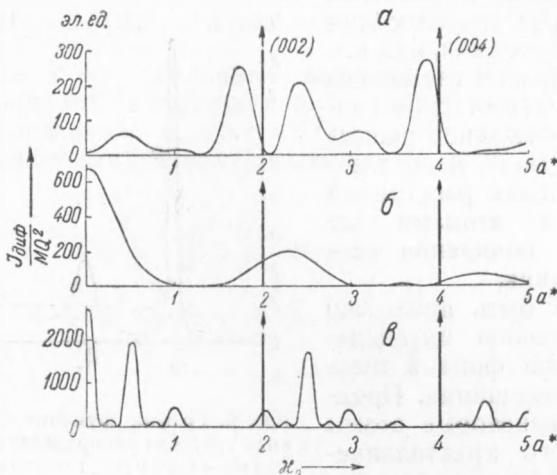


Рис. 4. Вычисленное в различных предположениях распределение $I_{\delta\omega}(H)$ вдоль направления [001] обратной решетки для сплава Al—Cu

расчете принято, что эти области имеют толщину ba и что концентрация атомов Cu 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. Merring, Acta Crystall., **2**, 371 (1949). ⁵ A. H. Geissler, C. S. Barrett and R. F. Mehl, Trans. AIME, **152**, 701 (1943). ⁶ A. H. Geissler and J. K. Hill, Acta Crystall., **1**, 238 (1948). ⁷ M. Laves, 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 и 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.