

Мессбауэровские исследования атомного распределения и сверхтонких взаимодействий в сплавах системы Mn–Fe со структурой β -Mn

© А.С. Виноградова, А.С. Илюшин, И.А. Никанорова, В.С. Рушаков

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова,
119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 12 февраля 1997 г.)

Методами мессбауэровской спектроскопии исследованы сплавы $Mn_{20-x}Fe_x$ ($x = 1-6.4$) со структурой β -Mn. Рассчитан тензор градиента электрического поля в кристаллографически неэквивалентных позициях 8(c) и 12(d). Проведена идентификация парциальных мессбауэровских спектров и получены значения параметров сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe . При замещении атомов марганца атомами железа в системе $Mn_{20-x}Fe_x$ наблюдается преимущественное расположение атомов Fe в позициях 8(c). С увеличением концентрации железа параметр дальнего порядка в расположении атомов Fe растет, а степень порядка падает.

В настоящее время механизмы магнитного упорядочения марганца и его сплавов по-прежнему вызывают повышенный интерес [1–3]. В случае твердых растворов замещения на основе марганца, в которых в качестве компоненты выступают атомы, имеющие удобные мессбауэровские изотопы (в первую очередь ^{57}Fe и ^{119}Sn), можно выявить распределение атомов по кристаллографически неэквивалентным позициям, исследовать сверхтонкие электрические и магнитные взаимодействия, а значит, получить важную информацию для изучения магнитных взаимодействий, возникающих в этих сплавах.

Мессбауэровские исследования системы Mn–Fe со структурой β -Mn проводились в ряде работ [4–7]. Было обнаружено упорядоченное распределение атомов Fe по кристаллографически неэквивалентным позициям структуры, существенно разные электронные состояния и динамические свойства атомов Fe, занимающих кристаллографически неэквивалентные позиции. В то же время у авторов этих работ не было единого мнения о том, какую модель расшифровки мессбауэровских спектров использовать и как идентифицировать полученные парциальные спектры, что, естественно, привело к противоречивым результатам и выводам.

Целью данной работы явилось исследование атомного распределения и сверхтонких взаимодействий в сплавах Mn–Fe со структурой β -Mn в помощью методов мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe . В работе уделено особое внимание выбору модели расшифровки и интерпретации мессбауэровских спектров.

1. Методика эксперимента

Слитки заданного состава сплавов $Mn_{20-x}Fe_x$ с $x = 1-6.4$ выплавлялись из металлов чистотой 99.9% в индукционной печи в атмосфере спектрально чистого аргона методом плавки в холодном тигле [8]. Далее они подвергались гомогенизирующему отжигу в кварцевых вакуированных ампулах при 900°C в течение 100 h с последующим закаливанием в воду. Рентгеновский

фазовый анализ показал, что в слитках фиксировалась структура, изотипная β -модификации марганца, а все сплавы однофазны. Мессбауэровские исследования сплавов были проведены при комнатной температуре на ЯГР-спектрометре электродинамического типа в режиме постоянного ускорения. Калибровка спектрометра по скоростям осуществлялась по спектру эталона карбонильного α -Fe с источником ^{57}Co в Rh. Модельная расшифровка и восстановление функций распределения сверхтонких параметров мессбауэровских спектров, а также расчет градиента электрического поля и оценка квадрупольного смещения мессбауэровской линии производились с помощью программного комплекса MSTools [9].

2. Результаты и обсуждение

Мессбауэровские спектры исследованных сплавов системы $Mn_{20-x}Fe_x$, полученные при комнатной температуре, оказались спектрами парамагнитного типа со схожей сверхтонкой структурой (рис. 1). Все спектры содержат две четко выраженные компоненты с существенно разной интенсивностью. Соотношение интенсивностей этих компонент меняется с изменением концентрации железа. Аналогичные мессбауэровские спектры были получены и в работах [1–4].

Авторы работы [4] при исследовании интерметаллических соединений системы $Mn_{20-x}Fe_x$ описывали полученные спектры двумя уширенными одиночными линиями, соответствующими двум кристаллографически неэквивалентным позициям в структуре β -Mn. Более интенсивная компонента в спектре связывалась с положениями атомов Fe в позициях 12(d), менее интенсивная — с положениями атомов Fe в позициях 8(c). В рамках выбранной модели было установлено, что атомы железа преимущественно занимают позиции 12(d), обладают существенно разными электронными состояниями и динамическими свойствами в разных неэквивалентных позициях.

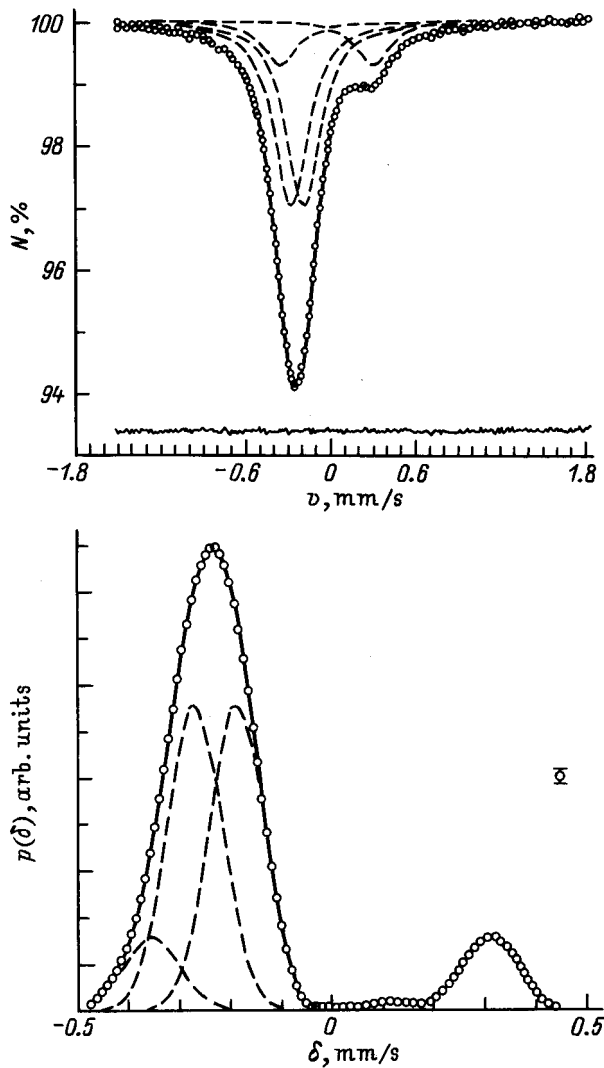


Рис. 1. Результаты модельной расшифровки мессбауэровского спектра и восстановления функции распределения сдвигов $p(\delta)$ компонент сверхтонкой структуры для ядер ^{57}Fe в сплаве $\text{Mn}_{18}\text{Fe}_2$.

В работе [5] использовалась модель, в которой спектр представлялся в виде суперпозиции одного синглета, относящегося к атомам железа в позициях 8(c) и описывающего наиболее интенсивную компоненту, и квадрупольного дублета, относящегося к атомам железа в позициях 12(d). Такая интерпретация спектра основывалась на результатах расчета градиента электрического поля, проведенного в работе [10] для обеих неэквивалентных позиций. Расчет проводился в приближении точечных зарядов с учетом только вкладов от атомов первой координационной сферы, обладающих зарядом +3. В соответствии с выбранной моделью расшифровки спектров авторы [5] сделали вывод о том, что 80% атомов железа в сплавах $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$ занимают позиции 8(c).

Изучение распределения атомов Fe по неэквивалентным позициям структуры $\beta\text{-Mn}$ было проведено в работах [6,7]. Наблюдаемая сверхтонкая структура спек-

тров описывалась в предположении о наличии двух квадрупольных дублетов. Дублет с малым квадрупольным расщеплением и большой интенсивностью приписывался атомам Fe в позициях 12(d), а дублет с большим квадрупольным расщеплением и меньшей интенсивностью — атомам Fe в позициях 8(c). Было отмечено преимущественное замещение атомов Mn атомами Fe в позиции 12(d): ~ 80% атомов Fe занимали позиции 12(d).

Как видно, даже в вопросе атомного распределения у авторов этих работ нет единого мнения, не говоря уже о значениях параметров сверхтонкого взаимодействия.

Для выбора модели расшифровки экспериментальных спектров учтем прежде всего то, что исследуемые нами образцы в соответствии с результатами рентгеновских исследований однофазны и имеют кристаллическую структуру $\beta\text{-Mn}$. Известно, что кубическая сложная решетка $\beta\text{-Mn}$ (пространственная группа $P4_132-O_7$) содержит 20 атомов в элементарной ячейке в двух кристаллографически неэквивалентных позициях: 8(c) и 12(d) [11]. Эти две позиции в $\beta\text{-Mn}$ отличаются как по точечной симметрии, так и по координации ближайшего окружения. Позиции 8(c) характеризуются координационным числом 12 и осью симметрии третьего порядка вдоль направлений $\langle 111 \rangle$. Первая координационная сфера имеет икосаэдрическую форму расположения атомов [12] со средним расстоянием до центра ~ 2.56 Å. Координационный многогранник позиции 12(d) с координационным числом 14 представляет собой сильно искаженный франк-касперовский многогранник [12] с осью симметрии второго порядка вдоль $\langle 110 \rangle$ и средним расстоянием до центра ~ 2.73 Å. Ни одна из позиций не имеет сферически-симметричного окружения, а следовательно, в спектре следует ожидать наличия, как минимум, двух квадрупольных дублетов, соответствующих позициям 8(c) и 12(d).

На рис. 1 представлен мессбауэровский спектр сплава $\text{Mn}_{18}\text{Fe}_2$, который был получен специально для выбора модели расшифровки. При приемлемой величине эффекта (~ 6%), чтобы не учитывать так называемый "эффект насыщения" [13], этот спектр был снят с большой статистикой. Качество спектра Q — отношение максимальной величины эффекта к стандартному отклонению статистических ошибок — равнялось 220. В результате расшифровки спектра с помощью программы SPECTR [13] в рамках моделей, использованных в работах [4,5], были получены заметные систематические отклонения от экспериментального спектра. При этом значения функционала χ^2 превышали теоретические значения на 30–60%. Другим недостатком этих моделей является большое (на 15–20%) отличие ширин парциальных спектров, относящихся к разным неэквивалентным позициям, что оказывается трудно объяснимым фактом. В то же время модель расшифровки, которая предполагает наличие двух квадрупольных дублетов, как это было принято в [6,7], хорошо описывает экспериментальный спектр: не наблюдается систематических отклонений от спектра, а значение функционала χ^2 согласуется с теоретическим.

При этом, однако, оказалось, что с точки зрения критерия χ^2 возможны различные варианты взаимного расположения компонент разных квадрупольных дублетов. В связи с этим мы восстановили функцию распределения сдвигов $p(\delta)$ компонент спектра с помощью программы DISTRI [14] из программного комплекса MStools. Оказалось (рис. 1), что левая мода распределения $p(\delta)$ асимметрична с отрицательным коэффициентом асимметрии $\chi = -0.22$. Это означает, что одну из компонент квадрупольного дублета с меньшей интенсивностью, которая явно не разрешается в экспериментальном спектре, следует искать левее двух компонент интенсивного квадрупольного дублета. Результат расшифровки функции распределения $p(\delta)$ в виде суперпозиции двух симметричных дублетов с компонентами гауссовой формы подтверждает это (рис. 1).

Обратим внимание на то, что ширины компонент разных квадрупольных дублетов оказались близкими по значению (отличие составило $\sim 3\%$) и практически совпадающими с шириной внутренних компонент эталонного спектра α -Fe (0.27 mm/s). Другими словами, появление атомов Fe вместо атомов Mn в первой координационной сфере атома Fe не приводит к заметному в эксперименте изменению сверхтонких параметров спектра: сдвига δ и квадрупольного смещения ε , а приводит лишь к слабому уширению компонент. При расшифровке спектров с существенно меньшим качеством Q вполне можно считать, что все компоненты обладают одинаковой шириной, что существенно повышает надежность и точность получаемого результата. Вопрос же о наличии или отсутствии дополнительных компонент можно решать путем сравнения экспериментально определяемых ширин с шириной внутренних компонент эталонного спектра α -Fe.

В табл. 1 представлены результаты расшифровки мессбауэровских спектров исследованных сплавов в рамках выбранной модели. Обратим внимание на существенные различия в значениях параметров сверхтонкого взаимодействия для двух парциальных спектров. Наиболее интенсивный квадрупольный дублет обладает меньшим

Таблица 1. Параметры сверхтонких взаимодействий системы $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$

x	$\delta_1, \text{mm/s}$	$ \varepsilon_1 , \text{mm/s}$	$I_1, \%$	$\delta_2, \text{mm/s}$	$ \varepsilon_2 , \text{mm/s}$	$I_2, \%$	$\Gamma, \text{mm/s}$
1.0	-0.244 ± 0.004	0.044 ± 0.004	84.0 ± 1.7	-0.021 ± 0.016	0.326 ± 0.016	16.0 ± 0.8	0.265 ± 0.006
2.0	-0.228 ± 0.002	0.051 ± 0.002	82.0 ± 1.1	-0.026 ± 0.007	0.335 ± 0.007	18.0 ± 0.5	0.274 ± 0.004
3.0	-0.239 ± 0.004	0.057 ± 0.004	74.2 ± 2.1	-0.037 ± 0.011	0.340 ± 0.011	25.8 ± 1.2	0.261 ± 0.008
5.0	-0.236 ± 0.012	0.048 ± 0.012	71.4 ± 3.7	-0.019 ± 0.026	0.319 ± 0.026	28.7 ± 2.3	0.278 ± 0.016
6.4	-0.236 ± 0.004	0.057 ± 0.004	68.0 ± 1.9	-0.048 ± 0.008	0.340 ± 0.008	32.0 ± 1.2	0.270 ± 0.008

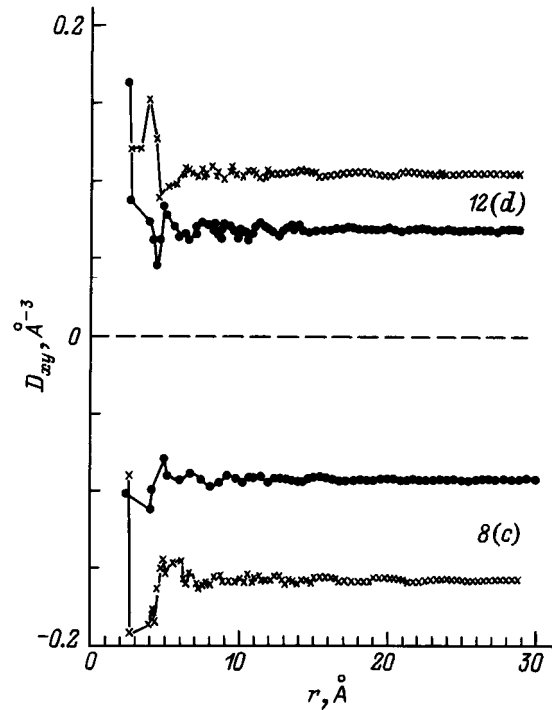


Рис. 2. Решеточные суммы D_{xy} для позиций 8(c) (кружки) и 12(d) (крестики) отдельно по атомам в позициях 8(c) и 12(d), находящимся внутри сферы радиуса r .

(на $\sim 0.21 \text{ mm/s}$) сдвигом и в несколько раз меньшим по величине квадрупольным смещением ε . Именно этим и воспользуемся для идентификации наблюдаемых парциальных спектров.

Различие в сдвигах мессбауэровской линии можно объяснить, если предположить, что наиболее интенсивный парциальный спектр соответствует атомам железа в позициях 8(c), а менее интенсивный — 12(d). Действительно, хорошо известно увеличение сдвига мессбауэровской линии ядер ^{57}Fe в чистом железе с увеличением объема со средним значением коэффициента объемного изменения сдвига $\partial\delta/\partial \ln V = 1.37 \text{ mm/s}$ [15]. Если учесть, что атомы железа в позиции 8(c) имеют среднее расстояние до атомов первой координационной сферы меньше, чем в случае позиции 12(d), на $\sim 0.17 \text{ \AA}$, то разность сдвигов для этих позиций получается равной -0.26 mm/s , что вполне согласуется с наблюдаемой величиной.

Что касается квадрупольных смещений, то для их сравнительного анализа необходимо провести расчеты тензора градиента электрического поля. Для металлов и интерметаллидов градиент электрического поля в области расположения ядер создается положительными зарядами, локализованными в узлах решетки, и электронами проводимости, анизотропно распределенными в пространстве (см., например, [16]). Для соединения β -Mn, учитывая малость анизотропии сдвига Найта [10], можно считать, что вклад от локализованных зарядов решетки будет определяющим. В этом случае тензор

Таблица 2. Расчетные значения квадрупольных смещений ϵ для неэквивалентных позиций в структуре β -Mn при различных значениях средних эффективных зарядов атомов, занимающих эти позиции

Позиция	ϵ , mm/s			
	$Mn_{8(c)}^{2+}, Mn_{12(d)}^{2+}$	$Mn_{8(c)}^{3+}, Mn_{12(d)}^{3+}$	$Mn_{8(c)}^{3+}, Mn_{12(d)}^{2+}$	$Mn_{8(c)}^{2+}, Mn_{12(d)}^{1+}$
8(c)	-0.106	-0.159	-0.302	-0.249
12(d)	-0.234	-0.350	-0.514	-0.400

градиента электрического поля, создаваемый на ядре, с учетом поляризации электронного остова равен

$$G = (1 - \gamma_\infty) G_{lat},$$

где γ_∞ — фактор антиэкранирования Штернхеймера ($\gamma_\infty = -9.14$ [17]), G_{lat} — тензор градиента электрического поля, создаваемого локализованными в узлах решетки зарядами. Тензор G_{lat} можно представить в виде

$$G_{lat} = \sum_t e_t D(t) = e_{8(c)} D(8(c)) + e_{12(d)} D(12(d)).$$

Здесь $e_{8(c)}$ и $e_{12(d)}$ — эффективные заряды атомов, занимающих позиции 8(c) и 12(d) соответственно, $D(t)$ — тензор решеточных сумм по атомам, занимающим позиции t , компонента которого равна

$$D_{ij}(t) = \sum_{k(t)} \frac{3x_k^i x_k^j - r_k^2 \delta_{ij}}{r_k^5},$$

где x_k^i — i -я координата k -го атома относительно точки наблюдения.

На рис. 2 представлены решеточные суммы D_{xy} отдельно по атомам в позициях 8(c) и 12(d), находящимся внутри сферы, в зависимости от радиуса r этой сферы. Обратим внимание на то, что суммы $D(8(c))$ и $D(12(d))$ по величине одного порядка и разных знаков для обеих позиций. Это означает, что относительно малые изменения этих сумм могут привести к заметным изменениям тензора градиента электрического поля. Следовательно, для его расчета необходимо использовать уточненные значения координат атомов и учитывать десятки координационных сфер. В нашем случае были использованы значения внутренних параметров структуры, полученные в работе [18], и учтены все атомы ($\sim 10^4$), находящиеся внутри сферы радиуса 29 Å (более 200 координационных сфер), что, как видно из рис. 2, достаточно для расчета G_{lat} с точностью в несколько процентов.

Вычисление квадрупольного смещения ϵ было проведено по формуле (см., например, [13])

$$\epsilon = \frac{e^2 q Q}{4} \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right)^{1/2},$$

где eQ — квадрупольный момент ядра (для ^{57}Fe $eQ = 0.146$ [19]), eq — главная компонента тензора

электрического поля G_{lat} , η — параметр асимметрии. В табл. 2 приведены результаты расчета квадрупольных смещений ϵ для обеих неэквивалентных позиций в структуре β -Mn. В соответствии с [12] можно ожидать, что величина эффективного заряда атома Mn, занимающего позицию 8(c), больше величины эффективного заряда атома Mn в позиции 12(d). Поэтому мы провели расчет при различных значениях средних эффективных зарядов атомов, занимающих эти позиции в исследуемых сплавах.

Расчетные значения квадрупольных смещений хорошо коррелируют с экспериментальными данными, особенно в случае одинаковых эффективных зарядов в обеих позициях. Наблюдаемые различия возникают, по-видимому, не только из-за использования произвольных значений эффективных зарядов, но и из-за самого приближения локализованных зарядов, которое не учитывает ковалентно-металлической электронной структуры сплавов.

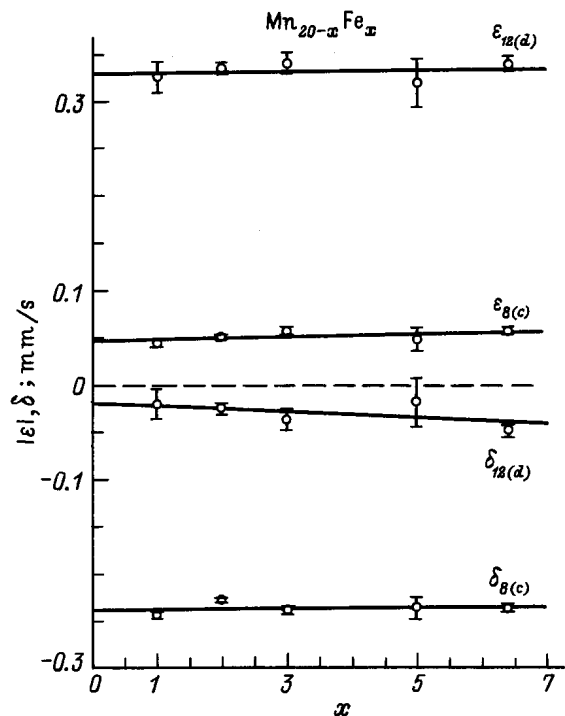


Рис. 3. Концентрационные зависимости параметров сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe в позициях 8(c) и 12(d).

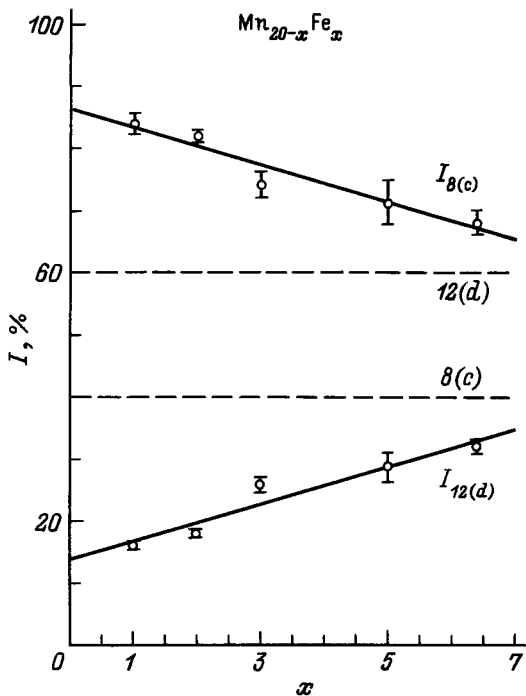


Рис. 4. Концентрационная зависимость относительных интенсивностей парциальных спектров. Штриховые линии соответствуют статистическому распределению атомов Fe и Mn.

Из табл. 2 видно, что при всех рассмотренных нами комбинациях зарядов атомов значения квадрупольного смещения для позиций 12(d) существенно больше по абсолютной величине, чем для 8(c). Основываясь на этом результате расчета, можно прийти к выводу о том, что парциальный спектр с большим квадрупольным смещением относится к позициям 12(d), а парциальный спектр с меньшим квадрупольным смещением — к позициям 8(c). Такая идентификация, как видно из сопоставления данных об относительных интенсивностях I и квадрупольных смещениях, представлены в табл. 1, соответствует предположению, сделанному на основе сравнительного анализа величин сдвигов парциальных спектров, а следовательно, может считаться наиболее вероятной.

В соответствии с проведенной идентификацией парциальных спектров на рис. 3 представлены концентрационные зависимости параметров сверхтонкого взаимодействия для ядер ^{57}Fe , занимающих обе кристаллографически неэквивалентные позиции. Как видно, сверхтонкие параметры практически не зависят от состава. Заметное уменьшение изомерного сдвига для позиции 12(d), по-видимому, связано с уменьшением расстояний до ближайших атомов при замещении атомов Mn меньшими атомами Fe.

В отличие от сверхтонких параметров, интенсивности парциальных спектров $I^{8(c)}$ и $I^{12(c)}$ имеют хорошо выраженную концентрационную зависимость (рис. 4). Поскольку интенсивность спектра для достаточно тон-

ких образцов пропорциональна числу мессбауэровских ядер (см., например, [13]), в предположении о равенстве вероятностей эффекта Мессбауэра для разных неэквивалентных позиций относительная интенсивность парциального спектра равна относительной заселенности данной позиции мессбауэровским атомом. Как видно из рис. 4, заселенности позиций 8(c) и 12(d) атомами железа существенно отличаются от значений, соответствующих статистическому распределению атомов железа и марганца по этим позициям. Наблюдается преимущественное расположение атомов железа в позициях 8(c). Несмотря на существенно меньшую кратность позиций 8(c) по сравнению с позициями 12(d), более 80% всех атомов Fe находятся в этих позициях. При увеличении концентрации атомов железа относительная заселенность позиций 8(c) атомами Fe заметно уменьшается.

Распределение атомов железа по узлам кристаллической решетки можно охарактеризовать параметром дальнего порядка ξ . В соответствии с [20] для атома Fe в бинарном твердом растворе замещения $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$ с позициями 8(c) и 12(d) введем параметр ξ следующим образом:

$$\xi = \frac{p_{\text{Fe}}^{8(c)} - C_{\text{Fe}}}{1 - q^{8(c)}}$$

Здесь $p_{\text{Fe}}^{8(c)} = \frac{I^{8(c)} x}{100 \cdot 8}$ — относительная концентрация атомов железа в позиции 8(c), $C_{\text{Fe}} = \frac{x}{20}$ — относительная концентрация атомов железа в сплаве, $q^{8(c)} = 0.4$ — относительная кратность позиции 8(c). В случае полного порядка при $x \leq 8$ атомы Fe разместятся только в позициях 8(c), при $x \geq 8$ они займут все позиции 8(c), а оставшаяся их часть разместится в позициях 12(d). При этом параметр дальнего порядка ξ будет принимать

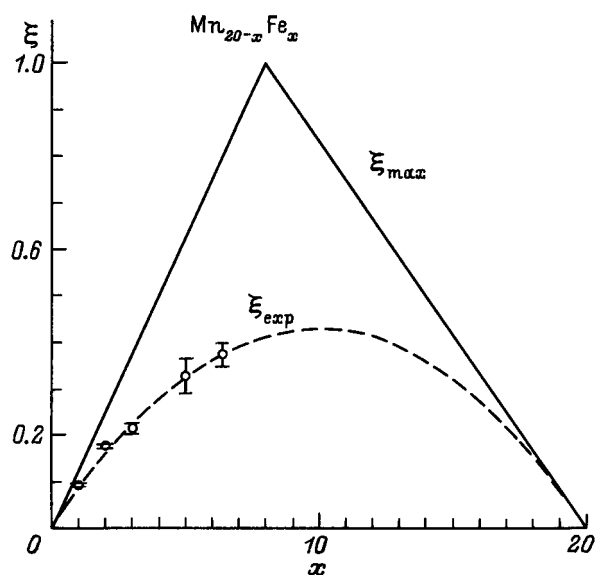


Рис. 5. Зависимости максимального ξ_{max} и экспериментально определенного ξ параметров дальнего порядка в расположении атомов Fe от концентрации железа.

свое максимально возможное значение $\xi_{\max} = x/8$ при $x \leq 8$ и $(20 - x)/12$ при $x \geq 8$. На рис. 5 представлены концентрационные зависимости экспериментально определенного ξ и максимального ξ_{\max} параметров дальнего порядка. Экспериментальные значения хорошо описываются кривой второго порядка. Обратим внимание на то, что с увеличением концентрации железа параметр дальнего порядка ξ в расположении атомов Fe в бинарном твердом растворе замещения $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$ растет, а степень порядка ξ/ξ_{\max} падает.

Изложенное позволяет сформулировать следующие выводы: 1) с помощью анализа особенностей кристаллической структуры и расчета тензора градиента электрического поля проведена идентификация парциальных мессбауэровских спектров и получены значения параметров сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe в кристаллографически неэквивалентных позициях сплавов $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$ ($x = 1-6.4$); 2) при замещении атомов марганца атомами железа в системе $\text{Mn}_{20-x}\text{Fe}_x$ наблюдается преимущественное расположение атомов Fe в позициях 8(c); 3) с увеличением концентрации железа параметр дальнего порядка ξ в расположении атомов Fe растет, а степень порядка ξ/ξ_{\max} падает.

Список литературы

- [1] Y. Kohori, Y. Noguchi, T. Kohara. J. Phys. Soc. Jap. **62**, 447 (1993).
- [2] M. Shiga, H. Nakamura, M. Nishi, K. Kakurai. J. Phys. Soc. Jap. **63**, 1656 (1994).
- [3] H. Nakamura, M. Shiga. In: Int. Conf. on the Phys. of Trans. Metals. Program and Abstracts. Osaka, Japan (Sept. 24–27, 1996). P. 44.
- [4] C.W. Kimball, J.K. Tison, M.V. Nevitt. J. Appl. Phys. **38**, 3, 1153 (1967).
- [5] Y. Nishihara, S. Ogawa, S. Waki. J. Phys. Soc. Jap. **42**, 3, 845 (1977).
- [6] А.С. Илюшин, А.А. Кацнельсон, И.А. Никанорова. Изв. вузов. Физика, **3**, 86 (1981).
- [7] А.С. Илюшин, И.А. Никанорова. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия, **23**, 5, 27 (1982).
- [8] D. Hukin. Brit. pat. N 1269762 (1972).
- [9] V.S. Rusakov, N.I. Chistyakova. Latin Amer. Conf. on Applications of the Mossbauer Effect. LACAME'92. Buenos Aires. Argentina (1992). N 7. P. 3.
- [10] L.E. Drain. Proc. Phys. Soc. **88**, 111 (1966).
- [11] П.И. Крипякевич. Кристаллография **5**, 2, 273 (1960).
- [12] В.К. Григорович. Металлическая связь и структура металлов. Наука, М. (1988). 296 с.
- [13] В.И. Николаев, В.С. Русаков. Мессбауэровские исследования ферритов. Изд-во МГУ, М. (1985). 224 с.
- [14] А.К. Жетбаев, К.К. Кадыржанов, Т.Э. Туркебаев, В.С. Русаков, М.Ш. Айманов. Фазовые преобразования в имплантационных системах металл–металлоид. Гылым, Алма-Ата (1995). 178 с.
- [15] T.E. Granshow. In: Advances in Mossbauer spectroscopy / Ed. V.V. Thosar and P.K. Lyengar. Amsterdam–Oxford–N.Y. (1983). P. 217–272.
- [16] В.В. Чекин. Мессбауэровская спектроскопия сплавов железа, золота и олова. Энергониздат, М. (1981). 107 с.
- [17] R.M. Sternheimer. Phys. Rev. **130**, 1423 (1963).
- [18] C.B. Shoemaker, D.P. Shoemaker, T.E. Hopkins. S. Yindepit. Acta Cryst. **B34**, 3573 (1978).
- [19] В.С. Русаков, Д.А. Храмов. Изв. РАН **56**, 7, 201 (1992).
- [20] М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов. Теория упорядочивающихся сплавов. Физматгиз. М. (1958). 388 с.