

# Особенности локальной атомной структуры сплава Fe—Si в $\alpha$ -области фазовой диаграммы

© Н.В. Ершов, Н.М. Клейнерман, В.А. Лукшина, В.П. Пилюгин, В.В. Сериков

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
Екатеринбург, Россия

E-mail: nershov@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 1 октября 2008 г.)

Атомная структура сплавов FeSi с концентрацией кремния 3–8 at.% ( $\alpha$ -область фазовой диаграммы) исследовалась методом мессбауэровской спектроскопии. Выяснилось влияние разупорядочения пластической деформацией под давлением и закалкой после отжига при температуре разупорядочения 850°C на структурное состояние сплавов. Показано, что пластическая деформация приводит к разупорядоченному состоянию только при минимальном содержании кремния (3 at.%), в остальных случаях имеет место локальное расслоение твердого раствора на области, обогащенные железом или кремнием. В закаленных образцах процесс расслоения сопровождается ближним упорядочением B2-типа, которое характеризуется увеличением объемной доли координации с двумя атомами Si в первой координационной сфере Fe, что соответствует ранее полученным данным рентгеновской дифракции.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 06-02-17082).

PACS: 75.50.Bb, 61.05.Qr

## 1. Введение

Мессбауэровские исследования сплавов системы Fe—Si с малым содержанием кремния имеют весьма продолжительную историю. В 1960-х годах было установлено, что при растворении в ОЦК-решетке железа до 10 at.% Si происходит существенное уширение спектра ядерного гамма-резонанса (ЯГР). Такие твердые растворы Fe—Si описывались как разупорядоченные. По мере повышения концентрации до стехиометрического состава Fe<sub>3</sub>Si (25% кремния) структура спектров усложняется, а ширина линий уменьшается, приближаясь к ширине линий в чистом железе. При 25% Si четко выделяются два подспектра, соответствующие двум наиболее вероятным координациям  $n_1 = 0$  и 4 ( $n_i$  — число атомов кремния в  $i$ -й координационной сфере вокруг поглощающего атома Fe). Для объяснения уширения линий спектра ЯГР в области неупорядоченного твердого раствора в работе [1] авторы в предположении, что ширины линий в спектрах сплавов (после внесения поправки на толщину образцов) должны быть такими же, как в чистом железе, дополнительно к координации  $n_1 = 0$  выделили несколько конфигураций, включающих один ( $n_1 = 1$ ) и два ( $n_1 = 2$ ) атома кремния в первой координационной сфере. При этом наблюдаются три значения сверхтонкого поля (СТП), соответствующие координациям  $n_1 = 0, 1$  и 2 (предполагается, что СТП уменьшается на  $0.08 \cdot H_{Fe}$  при добавлении одного атома Si в первой сфере). Их удельный вес хорошо соответствует расчетным вероятностям для случайного заполнения узлов атомами. Поэтому был сделан вывод о том, что СТП не зависит от концентрации кремния, а зависит от локального окружения узлов, занятых железом; при этом СТП линейно уменьшается в зависимости от количества ато-

мов Si в первой координационной сфере. Так как спектр, рассчитанный как сумма подспектров, соответствующих трем координациям ( $n_1 = 1, 2, 3$ ), недостаточно хорошо описывал экспериментальный спектр (что оценивалось по среднеквадратичному отклонению), авторы [1] предприняли более тонкое разложение. Эту работу они сделали на серии сплавов железа с ОЦК-решеткой, а именно с Al, Si, Mn, V и Cr [2].

В предположении аддитивности и независимости вкладов атомов кремния в ближайших координационных сферах были выделены разные координации, сочетающие присутствие атомов примеси в первой–пятой сферах. Было показано, что для достижения минимальной величины среднеквадратичного отклонения  $\chi^2$  в случае алюминия и кремния необходимо учитывать вклады трех первых сфер, при этом параметры подспектров берутся из данных ЯГР для чистого железа. Таким образом, авторы выделили следующие координации:  $(n_1 n_2 n_3) = (000)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(011)$ , входящие в  $n_1 = 0$ ,  $(n_1 n_2 n_3) = (100)$ ,  $(110)$  и  $(111)$ , входящие в  $n_1 = 1$ , и  $(n_1 n_2 n_3) = (200)$ ,  $(210)$ ,  $(211)$ , входящие в  $n_1 = 2$ . Были определены величины сдвигов СТП:  $-8, -4, +2\%$   $H_{Fe}$  для одного атома кремния в первой, второй, третьей и четвертой координационных сферах соответственно.

В 1972 г. были опубликованы результаты теоретического и экспериментального исследования зарядовых и спиновых возмущений вблизи немагнитных примесей Al и Si в железе [3]. Экспериментальные значения СТП и изомерного сдвига в образцах сплава Fe—Si (2–6 at.% кремния) были получены с помощью эффекта Мессбауэра, а теоретические зависимости возмущений спиновой плотности от расстояния до примеси рассчитаны в рамках приближения RKKY. Было показано, что зависимость сдвигов СТП от расстояния между

атомами Si и Fe имеет осциллирующий и затухающий характер. В работе [4] эта же зависимость сравнивается с плотностью поляризации  $4s$  электронов проводимости как функцией расстояния, рассчитанной теоретически для алюминия в железе. Получено хорошее совпадение на качественном уровне.

Если принять обоснованность такого подхода, при котором влияние примесных атомов на СТП на ядре атома железа аддитивно и изотропно, и изменения СТП зависят только от конкретной реализованной координации (т.е. от того, сколько узлов и в какой координационной сфере занимают атомы примеси), то его использование может позволить получить и исследовать тонкие особенности атомной структуры ОЦК-сплавов железа с кремнием или алюминием в области неупорядоченного твердого раствора и их зависимость от условий и режимов изготовления и термообработок исследуемых образцов.

Позднее появилась иная трактовка уширения ЯГР-спектра от сплавов железа, согласно которой вклад атома примеси в СТП происходит от электрического поля атома примеси, что объясняется псевдодипольным и квадрупольным эффектами в поле на атоме железа от замещения ближайшего соседа атомом примеси и, следовательно, зависит от взаимной ориентации оси пары (примесь—железо) и направления спонтанной намагниченности [5]. Эффект выражается в изменении СТП и пропорционален градиенту электрического поля от примеси на ядре поглощающего атома железа. Сдвиги СТП зависят не только от количества атомов примеси в ближайших сферах, но и от узла, который примесь занимает, т.е. эффект имеет анизотропный характер. В первом приближении рассматривается только проекция градиента электрического поля на направление спонтанной намагниченности, которое обычно в ОЦК-железе параллельно оси  $\langle 100 \rangle$ . Если ось пары Si—Fe параллельна направлению намагниченности, то сдвиг СТП положительный (в большие поля), если ортогональна — сдвиг отрицательный. Такая интерпретация тонкого разложения спектров ЯГР имела свое экспериментальное подтверждение в работе [6]. При измерении мессбауэровских спектров от одного монокристаллического образца, помещенного в постоянное магнитное поле, направленное в одном случае вдоль оси  $[100]$ , а в другом — вдоль оси  $[111]$ , в спектрах фиксировались небольшие различия. Но следует отметить, что разница в измеренных при разных ориентациях внешнего магнитного поля спектрах может быть объяснена и другими эффектами. Например, вклад процессов вращения при намагничивании вдоль оси  $[111]$  может привести к смещению спектра, не связанному с наведенной магнитной анизотропией вдоль оси  $[100]$ .

Таким образом, неоднократно было показано, что спектры ЯГР описываются подспектрами, каждый из которых соответствует некоторой конфигурации из атомов железа и примеси в локальном окружении атома Fe.

Поэтому для структурных исследований важно правильно сгруппировать отдельные вклады, соответствующие одной из основных конфигураций  $n_1 = 0, 1$  или  $2$ , и затем анализировать, как изменяются доли присутствия основных конфигураций в зависимости от условий приготовления образцов. При этом становится несущественным, что конкретно приводит к увеличению СТП на ядре железа: анизотропный вклад от атома примеси во второй координационной сфере [7] или атом примеси в третьей сфере [8]. Тем не менее в настоящей работе предлагается и обосновывается оригинальная трактовка происхождения подспектров, которая опирается на серию работ Stearns [1,2,4,9]. Утверждение о том, что в присутствии атомов кремния в ближайших координационных сферах СТП на ядре железа может быть больше, чем в чистом железе, недавно получило свое подтверждение в теоретических *ab initio* расчетах [10].

Ранние ЯГР-спектроскопические исследования сплавов FeSi в  $\alpha$ -области фазовой диаграммы использовали подход к анализу тонкой структуры мессбауэровских спектров, основанный на моделировании локальных атомных конфигураций и связанных с ними изменений СТП. В настоящем исследовании используется метод прямого моделирования спектра с помощью минимального набора секстетов с шириной линий для  $\alpha$ -Fe и соотношениями ширин линий внутри секстета, близкими по величине к их значениям для спектра чистого железа. Этот подход свободен от ограничений, которые неизбежно накладывают на результат методы, основанные на моделировании структуры сплава Fe—Si.

Целью настоящей работы является изучение особенностей локальной атомной структуры железокремнистых сплавов в неупорядоченной области равновесной фазовой диаграммы после разупорядочивающих воздействий, таких как пластическая деформация под давлением и закалка от высокой температуры (принятой ранее для этих сплавов в качестве температуры разупорядочения [11]) с помощью метода ЯГР-спектроскопии. Необходимо определить объемные доли различных локальных координаций в зависимости от способа получения разупорядоченного состояния и содержания кремния, а также сопоставить результаты ЯГР-спектроскопии с ранее полученными на тех же образцах данными рентгенодифракционных исследований [12].

## 2. Образцы и техника эксперимента

Объектами настоящего структурного исследования служили монокристаллические и поликристаллические образцы сплава Fe—Si. Монокристаллические образцы с 5 и 8 at.% кремния были вырезаны из монокристалла, выращенного по методу Бриджмена, в виде тонких дисков (толщина 0.3 mm, диаметр 8—9 mm) с кубической ориентацией кристаллографических осей. Плоскость образца сориентирована параллельно кристаллографической плоскости (010) (кубическая тексту-

**Таблица 1.** Состав, тип структуры и текстуры, способ обработки исследованных образцов сплава Fe–Si

Номер образца	Содержание Si, at.%	Тип структуры и текстуры	Способ обработки
1	3	Поликристалл	Закалка + пластическая деформация
2	6	» »	То же
3	8	» »	» »
4	5	Монокристалл, кубическая	Закалка 400 K/s
5	6	Монокристалл, госсовская	» »
6 <sup>i</sup>	6	То же	Закалка 150 K/s
7	8	Монокристалл, кубическая	Закалка 400 K/s

Примечание. <sup>i</sup>Результаты рентгенодифракционных исследований всех монокристаллических образцов, в том числе и образца № 6 приведены в работе [12].

ра), две оси легкого намагничивания [100] и [001] лежат в плоскости диска.

Образцы с „госсовской“ ориентацией (110) и содержанием кремния 6 at.%, имеющие диаметр около 10 mm, были изготовлены из большого зерна прокатанного листа электротехнической стали толщиной 0.35 mm. В этом случае плоскость образца параллельна кристаллографической плоскости (110) (госсовская текстура), только одна легкая ось [001] лежит в плоскости диска, в то время как оси [100] и [010] расположены под углом около 45° к плоскости образцов.

Все образцы были подвергнуты рафинирующему вакуумному отжигу при температуре 1050–1300°C в течение 2–6 h, после которого содержание углерода не превышало 0.005 wt.%. Затем с целью получения разупорядоченного состояния образцы были подвергнуты закалке в воду (скорость закалки 400 или 150 K/s [12]) от температуры разупорядочения 850°C [11]. Кроме того, были исследованы поликристаллические образцы с содержанием Si 3, 6, 8 at.%, которые после вакуумного отжига подвергались разупорядочению закалкой со скоростью 400 K/s и деформации методом сдвига под давлением. Полный список исследованных образцов приведен в табл. 1.

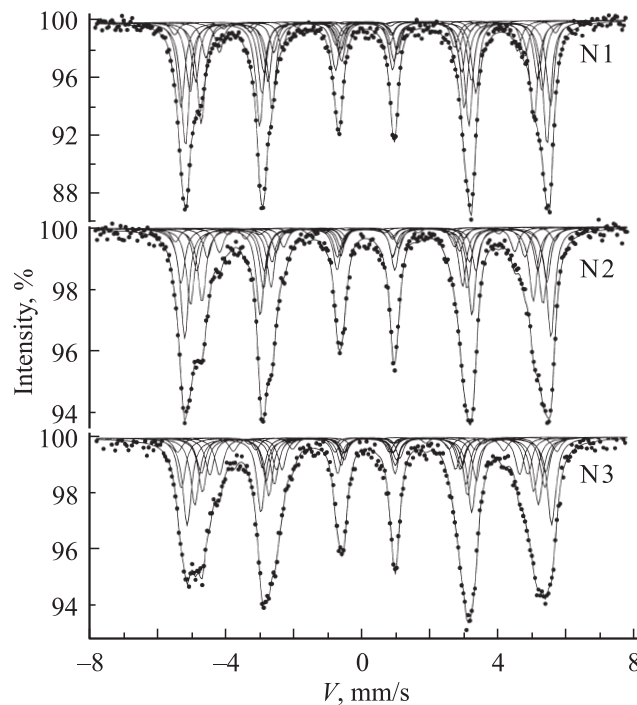
Мессбауровские спектры измерялись на модернизированном спектрометре ЯГРС-4М в режиме постоянных скоростей. Источником служил  $Co^{57}$  в матрице  $Cr$ . Коэффициент качества для спектров монокристаллических образцов был не ниже 100, а для спектров поликристаллических образцов из-за малости их размеров составлял 60–70, что было достаточно для математической обработки. Коэффициент качества  $K$  определяли как  $K = (N_{\infty} - N_a) / \sqrt{N_{\infty}}$ , где  $N_{\infty}$  — количество импульсов в нерезонансной области спектра,  $N_a$  — максимальное количество импульсов при резонансе. Количество каналов на спектр составляло 319. Обработка

спектров, которая сводилась к разложению на подспектры, проводилась с помощью программного обеспечения „MSTOOLS“ [13].

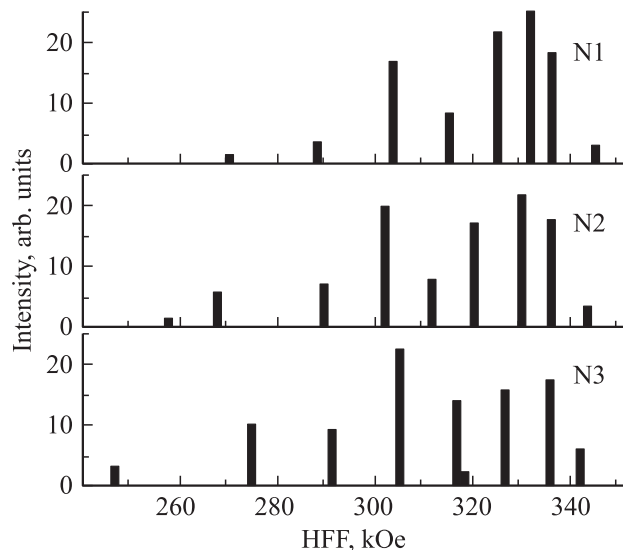
ЯГР-спектры моделировали в прямой задаче с помощью набора секстетов, которые имели одинаковую ширину линий и соотношения ширин линий внутри секстета, близкие к их значениям для спектра чистого железа. Результат модельного расчета подгоняли к экспериментально измеренным спектрам. Использованное приближение не учитывает различий в степени дефектности разных конфигураций окружения атомов Fe, что может служить объяснением тех погрешностей, которые неизбежно возникали при поиске минимума целевой функции в конкретных случаях. Однако основные результаты были подвергнуты тщательной проверке на устойчивость решения и могут рассматриваться в обсуждении. Интенсивности линий от отдельных атомных конфигураций представлены в виде гистограмм в распределении по сверхтонким полям.

### 3. Результаты эксперимента и их обсуждение

Измеренные мессбауровские спектры образцов с 3, 6 и 8 at.% Si, которые были разупорядочены пластической деформацией под давлением, показаны на рис. 1 вместе с набором подспектров, выделенных при математической обработке. Количество подспектров для описания



**Рис. 1.** ЯГР-спектры и результат их разложения на подспектры образцов сплава железо–кремний № 1 (3 at.% Si), 2 (6 at.% Si) и 3 (8 at.% Si), подвергнутых пластической деформации под давлением.



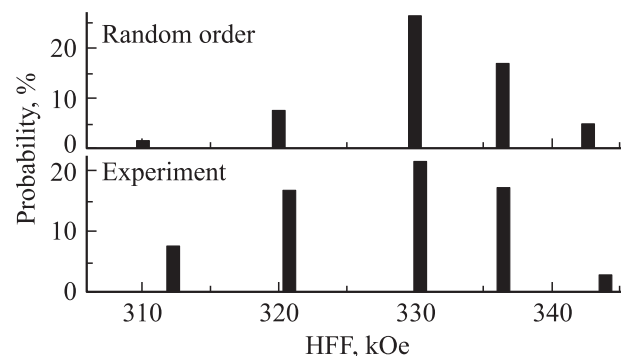
**Рис. 2.** Гистограммы интенсивностей, соответствующих вкладам отдельных конфигураций вокруг атомов железа, полученные разложением ЯГР-спектров образцов сплава железо–кремний № 1 (3 at.% Si), 2 (6 at.% Si) и 3 (8 at.% Si), подвергнутых пластической деформации под давлением.

экспериментальных результатов зависит от состава, и в каждом случае оно подбиралось для достижения минимально возможного среднеквадратичного отклонения и качественной оценки мелких особенностей спектров. Результат разложения ЯГР-спектров трех образцов, подвергнутых пластической деформации, приведен на рис. 2.

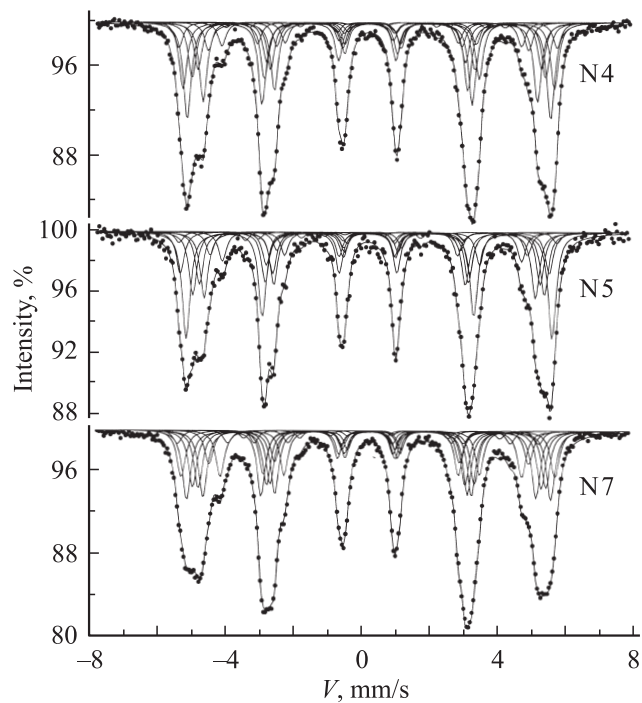
При наименьшей концентрации кремния 3 at.% в спектре выделяется восемь линий, соответствующих восьми различным конфигурациям. Используя данные по сдвигам СТП в разупорядоченном сплаве Fe–Si, приведенные в работе [2], можно отнести выделенные подспектры к следующим атомным конфигурациям (в порядке убывания полей):  $(n_1 n_2 n_3) = (002), (001), (000), (010), (020)$ ;  $(n_1 n_2) = (10), (11)$ ;  $n_1 = 2$ . Здесь конфигурация  $(n_1 n_2 n_3) = (000)$  имеет СТП, примерно соответствующее полю чистого железа ( $H_{Fe}$ ). Конфигурации с одним (001) и двумя (002) атомами в третьей сфере дают положительный сдвиг СТП относительно железа, равный  $\Delta H_{3n_3} \approx +0.02H_{Fe}$  и  $+0.04H_{Fe}$  соответственно, где  $\Delta H_3$  — величина сдвига СТП при наличии одного атома кремния в третьей координационной сфере. В остальных конфигурациях СТП ступенчато понижается в зависимости от количества атомов примеси во второй ( $\Delta H_2 \approx -0.04H_{Fe}$ ) и первой ( $\Delta H_1 \approx -0.08H_{Fe}$ ) координационных сферах. Следует отметить, что конфигурация без атомов кремния в первой координационной сфере  $n_1 = 0$  распадается на пять конфигураций, соответствующих пяти подспектрам. Такая сложная структура не воспроизводится в форме линий, относящихся к координациям  $n_1 = 1$  и 2. Таким образом, и в настоящем исследовании проявилось тонкое разложение части ЯГР-спектра, соответствующей высокому СТП, на

пять подспектров, которое неоднократно проявлялось в неупорядоченных Fe–Si сплавах ранее (см. Введение).

Чтобы проверить разумность предложенной здесь интерпретации тонкого разложения ЯГР-спектров, можно сопоставить расчетные вероятности пяти конфигураций, которые, по нашему предположению, входят в конфигурацию  $n_1 = 0$ , для случайного распределения 6% атомов кремния по узлам ОЦК-решетки железа, и экспериментальные интенсивности в диапазоне СТП от 310 до 350 kOe, например, для образца № 2 (рис. 3). Сравнение дает хорошее качественное совпадение при наличии



**Рис. 3.** Гистограммы вероятностей координаций без кремния в первой координационной сфере: построенная по данным работ Stearns (СТП) для случайного распределения по узлам и полученная из обработки экспериментальных результатов для концентрации кремния 6 at.%.



**Рис. 4.** То же, что на рис. 1, для монокристаллических образцов сплава железо–кремний № 4 (5 at.% Si), 5 (6 at.% Si) и 7 (8 at.% Si), закаленных со скоростью 400 K/s от температуры разупорядочения 850°C.

**Таблица 2.** Относительные интенсивности линий мессбауэровских спектров поликристаллических образцов после деформации и монокристаллических образцов после закалки: эксперимент и расчет (для случайного распределения атомов по узлам ОЦК-решетки)

Номер образца	$c_{Si}, \text{at.}\%$	$I_{(1)}/I_{(0)}$		$I_{(2)}/I_{(0)}$		$I_{(11)}/I_{(10)}$		$I_{(2)}/I_{(1)}$	
		Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет
1	3	0.27	0.25	0.02	0.03	0.23	0.18	0.08	0.11
2	6	0.40	0.51	0.08	0.11	0.34	0.38	0.21	0.21
3	8	0.58	0.7	0.18	0.21	0.41	0.52	0.32	0.31
4	5	0.37	0.41	0.09	0.08	0.31	0.32	0.24	0.18
5	6	0.41	0.51	0.11	0.11	0.29	0.38	0.28	0.21
7	8	0.5	0.7	0.21	0.21	0.5	0.52	0.42	0.31

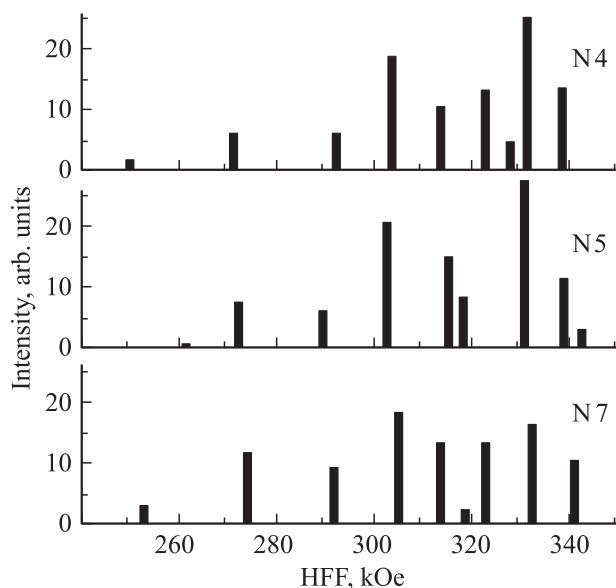
небольших отклонений интенсивности от средних значений для конфигураций с одним и двумя атомами кремния во второй сфере и двумя атомами Si в третьей сфере. Однако расхождения могут быть связаны не с ошибочностью предложенной интерпретации подспектров, а с особенностями реального локального атомного упорядочения в сплаве.

Спектры монокристаллических образцов № 4 (5 at.% Si), 5 (6 at.% Si) и 7 (8 at.% Si), закаленных от температуры разупорядочения, приведены на рис. 4, а гистограммы интенсивности линий разложения этих спектров — на рис. 5. Последние имеют несколько более сложную структуру, чем разложения для деформированных образцов. Тем не менее группы линий, соответствующих описанным выше конфигурациям, просматриваются достаточно хорошо: пять линий в диапазоне СТП от 310 до 350 кОе — линии конфигурации  $n_1 = 0$ ; две линии в пределах 290–305 кОе — конфигурации  $(n_1 n_2) = (10), (11)$ . В меньших полях отмечаются линии конфигураций  $n_1 = 2$  около 270 кОе (в нескольких случаях расщепленная) и  $n_1 = 3$  (около 250 кОе). При этом последняя линия отмечается в обоих образцах (№ 3 и 7) с наибольшей концентрацией кремния (8 at.%), что вполне объяснимо.

С целью анализа изменений локальной структуры на основе принятой здесь интерпретации были рассчитаны относительные интенсивности вкладов в ЯГР-спектры образцов от основных конфигураций  $n_1 = 0, 1$  и  $2$ , которые в табл. 2 сравниваются со статистическим весом соответствующих конфигураций неупорядоченного распределения кремния в железе при указанной концентрации кремния. Внутри конфигурации  $n_1 = 1$  выделены отдельные вклады от  $(n_1 n_2) = (10), (11)$ . Погрешность расчета значений, относящихся к экспериментальным данным, составляет  $\pm 4\%$ .

Если сравнить относительные интенсивности линий ЯГР-спектров и относительные вероятности конфигураций для случайного распределения атомов, то видно, что наиболее близко к разупорядоченному состоянию приближается образец № 1 с 3 at.% кремния, подвергавшийся пластической деформации под давлением. Небольшое отклонение от разупорядоченного состояния

состоит в преобладании относительной доли конфигурации  $n_1 = 1$  по сравнению с конфигурациями  $n_1 = 0$  и  $2$  за счет вклада  $(n_1 n_2) = (11)$ . Эта конфигурация может реализовываться двумя атомами кремния, которые находятся или в ближайшем соседстве (первые соседи), или на расстоянии четвертой координационной сферы. Известно, что атомы кремния хорошо растворяются в железе и не образуют сегрегаций. В богатой железом части фазовой диаграммы Fe–Si имеются две фазы  $B2$  и  $D0_3$ , для которых не характерна координация Si–Si (первые соседи). Имеющиеся в нашем распоряжении данные рентгеновской дифракции [12] и результаты *ab initio* кластерных расчетов [14] также отрицают возможность предельного сближения атомов кремния при растворении в  $\alpha$ -железе. Вследствие этого можно заключить, что по какой-то причине в разбавленном растворе разупорядочение сдвигом под давлением приводит



**Рис. 5.** То же, что на рис. 2, для монокристаллических образцов сплава железо–кремний № 4 (5 at.% Si), 5 (6 at.% Si), 7 (8 at.% Si), закаленных со скоростью 400 K/s от температуры разупорядочения 850°C.

к преимущественному образованию пар атомов Si–Si, являющихся четвертыми соседями.

В остальных образцах, содержащих больше кремния, имеют место значительные (превосходящие экспериментальную погрешность) отклонения от средних (неупорядоченных) значений. В образцах после пластической деформации значения ниже средних имеют отношения  $I_{(1)}/I_{(0)}$  и  $I_{(2)}/I_{(0)}$ , что означает увеличение объемной доли атомов железа, не имеющих примеси в первой координационной сфере. Значения  $I_{(2)}/I_{(1)}$  для образцов № 2 и 3 соответствуют пропорции для разупорядоченного состояния, и, следовательно, координации  $n_1 = 1$  и 2, с одной стороны, и  $n_1 = 0$ , с другой стороны, реализуются в разных локальных объемах сплава. При этом окружения  $(n_1 n_2) = (11)$  принадлежат переходным слоям между объемами, обедненными и обогащенными железом, и их относительная доля меньше, чем в однородно разупорядоченном растворе. Оценка эффективного состава из полученных мессбауэровских интенсивностей дает отклонение в 1% для образца с исходным содержанием 6% Si и чуть меньше для образца с 8% Si. Данные, полученные для образцов с 6 и 8 at.% кремния, подвергнутых пластической деформации, свидетельствуют о расслоении в этих сплавах.

В монокристаллических образцах после закалки от температуры разупорядочения также проявляется локальное расслоение. При заниженных относительно случайного распределения значениях отношения  $I_{(1)}/I_{(0)}$  отношения  $I_{(2)}/I_{(0)}$  и  $I_{(2)}/I_{(1)}$  существенно превышают аналогичные пропорции для среднестатистического распределения атомов. Интенсивность линии  $I_{(2)}$  пропорциональна объемной доли координации  $n_1 = 2$ , которая может быть реализована парой атомов кремния, расположенных по ребру кубической элементарной ячейки (вторые соседи, т.е. один атом кремния находится во второй координационной сфере первого атома), по диагонали грани ячейки (третьи соседи) или диагонали куба ячейки (пятые соседи). Если упорядочение приводит к образованию пар кремний–кремний, то соседние с ними атомы железа в ОЦК-решетке могут иметь различные координации. Так, для пар Si–Si, являющихся вторыми соседями (ближний порядок B2-типа), характерно локальное окружение, в котором ближайшие атомы железа участвуют в конфигурациях  $n_1 = 1$  и 2 с одним (восемь атомов Fe) или двумя (четыре атома Fe) атомами примеси в первой сфере соответственно либо  $(n_1 n_2 n_3) = (010)$  и  $(001)$  без атомов примеси в первой координационной сфере. Таким образом, около каждой такой пары формируется окружение, вносящее вклады в интенсивности  $I_{(1)}$  и  $I_{(2)}$ , при этом отношение этих интенсивностей  $I_{(2)}/I_{(1)}$  равняется 0.5. Экспериментальные отношения  $I_{(2)}/I_{(1)}$  существенно превышают среднестатистические значения для соответствующих концентраций примеси, но и не достигают значения в 0.5. Это может быть признаком лишь того, что значительная часть атомов кремния не участвует в образовании B2-ближнего порядка (пар атомов кремния, являющихся вторыми соседями).

Пара атомов Si–Si, расположенных по диагонали грани и являющихся третьими соседями, в своем окружении дает такие же локальные конфигурации с тем различием, что у одной пары два первых соседа имеют координацию  $n_1 = 2$  и двенадцать соседних атомов — координацию  $n_1 = 1$ . В конфигурациях без атомов примеси в первой сфере имеются координации  $(020)$  и  $(002)$ . Поэтому в случае установления такого порядка по всему объему отношение  $I_{(2)}/I_{(1)}$  должно быть равно  $1/6 \approx 0.17$ . Экспериментальные результаты для монокристаллических образцов дают значения, значительно превосходящие эту величину. Это показывает, что такое упорядочение пар атомов кремния, скорее всего, в исследуемых сплавах не реализуется.

Образование пар по диагонали элементарной ячейки также маловероятно, потому что вокруг такой пары из 15 ближайших соседей только один атом Fe будет одновременно первым соседом для двух атомов Si, остальные четырнадцать атомов будут входить в конфигурацию  $n_1 = 1$ ; следовательно, отношение  $I_{(2)}/I_{(1)}$  должно стремиться к  $1/14 \approx 0.07$ . Это же упорядочение должно приводить к таким координациям без кремния в первой сфере, как  $(010)$ ,  $(001)$  и  $(011)$ .

Таким образом, показано, что большая пластическая деформация приводит к состоянию, максимально близкому к разупорядоченному, только при концентрации кремния 3 at.%. При увеличении содержания кремния в сильно деформированных образцах появляются признаки локального расслоения, связанного с образованием областей, обогащенных железом и кремнием, и промежуточного слоя между ними.

В монокристаллах, прошедших закалку от температуры разупорядочения, процесс расслоения сопровождается локальным упорядочением атомов кремния. Таким образом, результаты ЯГР-спектроскопических исследований качественно совпадают со структурными характеристиками локального упорядочения, полученными ранее методом рентгеновской дифракции [12], и существенно дополняют их данными о количественных изменениях в объемных долях разных конфигураций.

## 4. Заключение

Основные результаты проведенного исследования особенностей атомной структуры железокремнистых сплавов в  $\alpha$ -области фазовой диаграммы после разупорядочивающих воздействий, таких как пластическая деформация под давлением и закалка после отжига при высокой температуре, сводятся к следующему.

1) В результате разупорядочения пластической деформацией под давлением только при наименьшей концентрации кремния 3 at.% получается состояние, близкое к неупорядоченному распределению атомов по узлам ОЦК-решетки.

2) При 6 и 8 at.% кремния после пластической деформации в образцах наблюдается ближнее расслоение, связанное с образованием областей, обогащенных железом и кремнием, и промежуточного слоя между ними.

3) В образцах сплавов после закалки от температуры разупорядочения к расслоению добавляется локальное упорядочение.

Таким образом, атомная структура сплава  $\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x$  при  $x = 0.05, 0.06$  представляется как неоднородная: имеет место расслоение на обедненную кремнием ОЦК-решетку железа и обогащенные кремнием кластеры с  $B2$ -упорядочением. При  $x = 0.08$  появляются кластеры  $D0_3$ -фазы, которые сосуществуют с  $B2$ -кластерами [12]. Структура  $B2$ -кластеров может быть представлена как ядро из двух пристыкованных гранями  $B2$ -ячеек, окруженное растянутыми ячейками  $\alpha$ -железа [12].  $B2$ -кластеры имеют анизотропную форму — они более протяженные вдоль одной из осей легкого намагничивания  $\langle 100 \rangle$ . При этом значительная часть атомов кремния не участвует в образовании пар Si–Si, ориентированных по направлениям  $\langle 100 \rangle$ .

Результаты исследования локального атомного упорядочения в разупорядоченных сплавах  $\alpha$ -FeSi, выполненного методами рентгеновской дифракции и ЯГР-спектроскопии, показывают, что использованный комбинированный подход применим для анализа изменений в структуре магнитомягкого сплава железо–кремний, которые происходят под воздействием термомагнитной или термомеханической обработки [15].

Авторы благодарны Е.В. Ворониной и Е.П. Елсукову за полезные обсуждения результатов мессбауэровских исследований, Б.Н. Филиппову за всемерную поддержку в выполнении экспериментальных исследований.

## Список литературы

- [1] M.B. Stearns. Phys. Rev. **129**, 1136 (1963).
- [2] M.B. Stearns. Phys. Rev. **147**, 439 (1966).
- [3] G. Gruner, I. Vincze. L. Cser. Solid State Commun. **10**, 347 (1972).
- [4] A.V. Overhauser, M.B. Stearns. Phys. Rev. Lett. **13**, 316 (1964).
- [5] T.E. Cranshaw, C.E. Johnson, M.S. Ridout, G.A. Murray. Phys. Lett. **210**, 5, 481 (1966).
- [6] T.E. Cranshaw. J. Phys. F: Metal Phys. **2**, 615 (1972).
- [7] Г.А. Дорофеев, В.С. Литвинов. Металлофизика **4**, 3, 38 (1982).
- [8] E.V. Voronina, A.L. Ageyev, E.P. Yelsukov. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **73**, 90 (1993).
- [9] M.B. Stearns. Phys. Rev. B **6**, 9, 3326 (1972).
- [10] Н.В. Ершов, А.К. Аржников, Л.В. Добышева, Ю.П. Черненко, В.И. Федоров, В.А. Лукшина. ФТТ **49**, 1, 64 (2007).
- [11] K. Nilfrich, W. Kolker, W. Petry, O. Scharpf, E. Nembach. Acta. Met. Mater. **42**, 3, 743 (1994).
- [12] Н.В. Ершов, Ю.П. Черненко, В.А. Лукшина, В.И. Федоров. ФТТ **51**, 3, 417 (2009).
- [13] В.С. Русаков. Мессбауэровская спектроскопия локально неоднородных систем. ОПНИ ИЯФ НЯЦ РК, Алматы (2000). 438 с.
- [14] А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев, Н.В. Ершов, В.А. Лукшина, Ю.П. Черненко, В.И. Федоров. ФТТ **49**, 12, 2184 (2007).
- [15] Yu.P. Chernenkov, N.V. Ershov, V.A. Lukshina, V.I. Fedorov, B.K. Sokolov. Phys. B: Cond. Matter **396**, 1–2, 220 (2007).