



Doctoral Thesis

Paarkorrelationen im Spinglas Cu-17 at.% Mn

Author(s):

Roelofs, Hans

Publication Date:

1995

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-001448311> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Paarkorrelationen im Spinglas Cu-17 at.% Mn

ABHANDLUNG

zur Erlangung des Titels

DOKTOR DER NATURWISSENSCHAFTEN

der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE

ZÜRICH

vorgelegt von

Hans Roelofs

Dipl. Phys. ETH

geboren am 27. Januar 1962

von den Niederlanden

Referent: Prof. Dr. G. Kostorz,
Institut für Angewandte Physik

Korreferenten: Prof. Dr. H. Neuhäuser,
Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik,
Technische Universität Carolo-Wilhelmina, Braunschweig

PD Dr. B. Schönfeld,
Institut für Angewandte Physik

Zusammenfassung

Zwei Cu-17,2 at.% Mn-Einkristalle wurden nach dem Bridgman-Verfahren hergestellt und anschliessend zur Einstellung eines Gleichgewichtszustands der atomaren Nahordnung bei 483 K ausgelagert. Mit dem Ziel, die Warren-Cowley-Nahordnungsparameter, die magnetischen Nahordnungsparameter und die linearen statischen Verzerrungskoeffizienten zu bestimmen, wurde die elastisch diffuse Neutronen- und Röntgenstreuung gemessen. Dazu wurden zwei Experimente am Dreiachsenspektrometer am Labor für Neutronenstreuung (LNS) am Paul Scherrer Institut (PSI, Villigen, CH) und ein Experiment am ORNL-Messstand X14 an der National Synchrotron Light Source (NSLS, Brookhaven, USA) durchgeführt.

Zur Bestimmung der Warren-Cowley-Nahordnungsparameter wurde die elastisch diffuse Neutronenstreuung bei Zimmertemperatur in einem minimalen Separationsvolumen des reziproken Raums gemessen. Die diffusen Peaks der Nahordnungsstreuung lagen an $1 \frac{1}{2} 0$ -Positionen. Warren-Cowley-Nahordnungsparameter und lineare statische Verzerrungskoeffizienten wurden nach der Gausschen Methode der kleinsten Fehlerquadrate angepasst. Aus den Nahordnungsparametern wurden effektive Paarpotentiale mit der inversen Monte-Carlo-Methode ermittelt und zur Berechnung der diffusen Antiphasengrenzenergie γ_{SRO} verwendet. Für Kupferlegierungen wurde vorgeschlagen, dass die Konzentrationsabhängigkeit von γ_{SRO} den Übergang von welliger zu planarer Gleitung bestimmt. Die unterschiedlichen Konzentrationsbereiche für diesen Übergang bei Cu-Mn, Cu-Al und Cu-Zn können auf das Verhalten von γ_{SRO} zurückgeführt werden.

Die diffuse magnetische Neutronenstreuung in der (001)-Ebene des reziproken Raums wurde aus der Differenz zwischen den bei 16 K gemessenen Intensitäten und den bei Zimmertemperatur gemessenen Intensitäten erhalten. Breite diffuse Peaks an der Position $1 \frac{1}{2} 0$ mit überlagerten scharfen Peaks an $1 \frac{1}{2} \pm \delta 0$ -Positionen wurden gefunden. Für die Anpassung der Streuintensität mit Hilfe der Gausschen Methode wurde angenommen, dass in der (110)-Ebene keine magnetische Streuung auftritt. Die Ergebnisse bestätigen die in der Literatur dokumentierte antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins und die ferromagnetische Wechselwirkung übernächster Nachbarn. Trotzdem ist die Güte der Anpassung der magnetischen Nahordnungsparameter an die Messdaten unbefriedigend, und es wird deshalb ein weiteres Experiment vorgeschlagen.

Um feststellen zu können, ob die diffuse Neutronenstreuung bei Zimmertemperatur

einen im reziproken Raum modulierten magnetischen Streubeitrag enthält, wurde als Vergleich die diffuse Röntgenstreuung in einem Volumen des reziproken Raums bei Zimmertemperatur gemessen. Die Energie des einfallenden Röntgenstrahls wurde bei $E = 6526$ eV, an der K-Absorptionskante von Mangan gewählt, was einen möglichst guten Kontrast garantiert. Die gute $|\hbar|$ -Auflösung der Messung am Synchrotron wurde weiter dazu genutzt, in linearen 'Scans' mit einer kleinen Schrittweite gezielt nach möglichen Peaks der atomaren Nahordnungsstreuung an den $1 \frac{1}{2} \pm \delta$ 0-Positionen zu suchen.

Die Nahordnungsintensitäten wurden mit der Methode von Georgopoulos und Cohen von der Verzerrungsstreuung getrennt. Die mit der Gausschen Methode angepassten Warren-Cowley-Nahordnungsparameter stimmen gut mit den Ergebnissen der Neutronenstreuung überein. Eine Modulation der magnetischen Streubeiträge in der diffusen Neutronenstreuung an Cu-17 at.% Mn kann deswegen bei Zimmertemperatur innerhalb der Messgenauigkeit ausgeschlossen werden.

Es wurde kein Hinweis auf die Existenz von Peaks in der atomaren Nahordnungsstreuung an den $1 \frac{1}{2} \pm \delta$ 0-Positionen gefunden. Falls sie auftreten, liegen sie vollständig unter den dominanten $1 \frac{1}{2}$ 0-Peaks.

Diese Arbeit wurde mit zwei weiteren Messungen mit Energien des Röntgenstrahls bei $E = 8903$ eV und bei $E = 8963$ eV am Speicherring fortgesetzt. In Kombination mit der hier vorgestellten Messung an der K-Absorptionskante von Mangan werden sie die Bestimmung der individuellen atomaren Verschiebungen mit Hilfe der '3 λ -Methode' ermöglichen.

Summary

Two Cu-17.2 at.% Mn single crystals were grown by the Bridgman technique and subsequently aged at 483 K to produce an equilibrium state of atomic short-range order. The elastic diffuse neutron and X-ray scattering was measured to deduce Warren-Cowley short-range order parameters, magnetic short-range order parameters and coefficients of linear static displacement scattering. Therefore two experiments were performed at the triple-axis spectrometer R5 at the 'Labor für Neutronenstreuung' (LNS) at the 'Paul Scherrer Institut' (PSI, Villigen, CH) and one experiment was performed at the ORNL beamline X14 at the National Synchrotron Light Source (NSLS, Brookhaven, USA).

The elastic diffuse neutron scattering was measured at room temperature in a minimum separation volume of reciprocal space to deduce Warren-Cowley short-range order parameters. The diffuse peaks of short-range order scattering were centered at $1 \frac{1}{2} 0$ positions. Warren-Cowley short-range order parameters and coefficients of linear static displacement scattering were determined by least-squares fitting. Effective pair potentials obtained from the short-range order parameters by applying the inverse Monte Carlo method were used to calculate the diffuse antiphase boundary energy γ_{SRO} . For copper-base alloys the concentration dependence of γ_{SRO} has been suggested as a reason for the transition of wavy to planar slip. Based on the values of γ_{SRO} , the concentration ranges for the transition in Cu-Mn, Cu-Al and Cu-Zn may be understood.

The diffuse magnetic neutron scattering in the (001)-plane of reciprocal space was obtained by subtracting the measured intensities at room temperature from the measured intensities at 16 K. Broad diffuse peaks at the position $1 \frac{1}{2} 0$ were found to be accompanied by sharper peaks at the positions $1 \frac{1}{2} \pm \delta 0$. Before applying the least-squares fitting procedure, the magnetic scattering within the (110)-plane was assumed to be zero. The results confirm the antiferromagnetic interaction between neighbouring spins and the ferromagnetic interaction between the next ones as has been reported in the earlier literature. Nevertheless the quality of the fit is unsatisfactory and therefore a further experiment is proposed.

The X-ray scattering was measured at room temperature within a volume in reciprocal space. The comparison between the X-ray and neutron scattering results was used to decide whether magnetic scattering modulated in reciprocal space occurs or not. To optimize the scattering contrast the energy of the incoming X-rays was set to

$E = 6526$ eV which is at the K-absorption edge of Mn. Furthermore, the excellent $|\Delta k|$ -resolution of the synchrotron experiment allowed linear scans to be performed with sufficiently small step size to look for possible peaks at $1 \frac{1}{2} \pm \delta 0$ positions within the atomic short-range order intensity distribution.

Applying the Georgopoulos-Cohen method the atomic short-range order intensities were separated from the displacement scattering. The Warren-Cowley short-range order parameters as determined by least-squares fitting agreed well with the results of the neutron scattering experiment. The contribution of modulated magnetic scattering to the diffuse neutron scattering at room temperature can therefore be excluded within the error bars of the experiment.

No hints for the existence of atomic short-range order peaks at $1 \frac{1}{2} \pm \delta 0$ positions were observed. If these peaks really occur, they are lying completely beneath the dominant $1 \frac{1}{2} 0$ peak.

This work has been continued with two incident X-ray energies at $E = 8903$ eV and $E = 8963$ eV. In combination with the presented measurement at the K-absorption edge of Mn, they will allow individual atomic displacements to be determined on the basis of the '3 λ -method'.