

# Diffuse Neutronenstreuung an $\alpha$ - CU-ZN-Legierungen

## Nahordnung und Wechselwirkungen

**Doctoral Thesis**

**Author(s):**

Reinhard, Leszek

**Publication date:**

1989

**Permanent link:**

<https://doi.org/https://doi.org/10.3929/ethz-a-000599399>

**Rights / license:**

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


**DIFFUSE NEUTRONENSTREUUNG**  
**AN  $\alpha$ -CU-ZN-LEGIERUNGEN:**  
**NAHORDNUNG UND WECHSELWIRKUNGEN**

ABHANDLUNG

zur Erlangung des Titels  
DOKTOR DER NATURWISSENSCHAFTEN  
der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE  
ZÜRICH

vorgelegt von  
LESZEK REINHARD  
Dipl. Phys. ETH  
geboren am 26. Oktober 1959  
von Baden (AG)

angenommen auf Antrag von:  
Prof. Dr. G. Kostorz, Referent  
Prof. Dr. P. Haasen, Korreferent  
Dr. B. Schönfeld, Korreferent

  
Prof. Dr. G. Kostorz

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Untersuchung wurden mit der diffusen Neutronenstreuung die Nahordnung und die atomaren Verschiebungen in  $\alpha$ -Cu-Zn-Legierungen verschiedener Zusammensetzung bestimmt. Aus den Nahordnungsparametern konnten die zugrundeliegenden zwischenatomaren Wechselwirkungen gewonnen werden.

Es wurden drei monokristalline Proben der Zusammensetzung Cu-31,1 at.% Zn (Probe 1), Cu-30,5 at.% Zn (Probe 2) und Cu-22,4 at.% Zn (Probe 3) hergestellt, wobei für die Proben 1 und 3 zur Verstärkung des Streukontrastes isotopenreines  $^{65}\text{Cu}$  verwendet wurde. Durch eine geeignete Wärmebehandlung der Proben wurde sichergestellt, dass die gemessenen Atomverteilungen Zustände im thermodynamischen Gleichgewicht bei 473 K (Proben 1 und 2) bzw. 493 K (Probe 3) darstellten.

Die Experimente wurden auf einem Dreiachsenspektrometer (Labor für Neutronenstreuung der ETHZ, Würenlingen) durchgeführt, so dass die inelastischen Streuanteile (thermisch-diffuse Streuung) abgetrennt werden konnten. Es wurden jeweils die (001)-, (011)- und (111)-Ebenen des reziproken Raums ausgemessen.

Charakteristisch für die diffuse Streuintensität sind vier Maxima in der (001)-Ebene um die 110-Position. Diese Maxima spiegeln die flachen Anteile der Fermifläche in  $\langle 110 \rangle$ -Richtung wider. Die aus den Positionen der Maxima erhaltenen Längen des Fermivektors  $k_{110}^F$  stimmen gut mit den Resultaten von Positronenannihilationsmessungen überein.

Aus den gemessenen Streuintensitäten konnten mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate 71 Nahordnungsparameter und 40 lineare Verzerrungsparameter bestimmt werden. Die Nahordnungsparameter sind bis zu einem Abstand von vier Gitterkonstanten signifikant von Null verschieden. Ihre Ähnlichkeit bei den — bis auf den Streukontrast — nahezu identischen Proben 1 und 2 deutet auf adäquate Auswertung hin. Probe 3, mit geringerem Zinkgehalt, zeigte hingegen eine weniger ausgeprägte Nahordnung. Die Variation des Streukontrastes zwischen den Proben 1 und 2 erlaubte es, die individuellen atomaren Verschiebungen abzuschätzen, welche durchweg kleiner als 1% der jeweiligen Gitterkonstante waren.

Aus den Nahordnungsparametern wurden sowohl mit der näherungsfreien inversen Monte-Carlo-Methode als auch mit der Hochtemperaturnäherung von Clapp und Moss Paarwechselwirkungen bestimmt. Beide Auswertemethoden führ-

ten zu ähnlichen Ergebnissen. Insbesondere wurde eine dominante Paarwechselwirkungsenergie nächster Nachbarn von ca. 20 meV gefunden. Es ergab sich kein Hinweis auf eine ausgeprägte Konzentrationsabhängigkeit der Paarwechselwirkungen.

Eine Häufigkeitsanalyse der Nahordnungskonfigurationen nach Clapp wurde an modellierten Kristallen durchgeführt. Es zeigte sich, dass solche Atomanordnungen bevorzugt auftreten, die mit einer  $L1_2$ -Struktur mit Antiphasengrenzen verträglich sind. In Übereinstimmung damit ergab eine Monte-Carlo-Simulation mit den experimentell erhaltenen Paarwechselwirkungen bei der stöchiometrischen Zusammensetzung  $\text{Cu}_3\text{Zn}$  die langperiodische  $D0_{23}$ -Struktur als wahrscheinliche Tieftemperaturphase. Die Uebergangstemperatur zum  $\alpha$ -Mischkristall wurde zu ca. 330 K abgeschätzt.

## Summary

In the present study short-range order and atomic displacements in  $\alpha$ -Cu-Zn alloys of various compositions have been investigated by means of diffuse neutron scattering. From the short-range order parameters, it was possible to deduce the underlying interatomic pair interactions.

Three single crystalline samples of Cu-31.1 at.% Zn (sample 1), Cu-30.5 at.% Zn (sample 2) and Cu-22.4 at.% Zn (sample 3) were prepared. Isotopically pure  $^{65}\text{Cu}$  was used with samples 1 and 3 in order to enhance the scattering contrast. The heat treatment chosen was appropriate to investigate states of thermodynamical equilibrium at 473 K (samples 1 and 2) and 493 K (sample 3).

The experiments were performed at the triple-axis spectrometer of the 'Labor für Neutronenstreuung' of the ETH Zürich at Würenlingen. With all samples, the diffuse scattering distribution was measured in the reciprocal-lattice planes (001), (011) and (111).

The diffuse scattering distribution typically showed four maxima in the (001) plane around the 110 position. These maxima are due to the flat portions of the Fermi surface along the  $\langle 110 \rangle$  direction. The lengths of the Fermi vectors  $k_{110}^F$  as determined from the positions of these maxima are in good agreement with the results of positron annihilation experiments.

From a least-squares fitting of the diffuse scattering intensity 71 short-range order parameters and 40 linear-displacement parameters were obtained. Significant deviations from a random distribution were found for distances up to four lattice parameters. Samples 1 and 2, nearly identical except for the scattering contrast, yield very similar short-range order parameters, thus indicating an appropriate evaluation. Sample 3 with less zinc content showed a lower degree of short-range order. The individual atomic displacements were estimated to be less than 0.01 lattice parameters.

From the short-range order parameters the pair interactions were determined by the approximation-free inverse Monte-Carlo method as well as by the high-temperature approximation of Clapp and Moss. Both methods give similar results. The pair interactions for nearest neighbours are dominant, with an energy of about 20 meV. There were no indications for a distinct dependence of the pair interactions with concentration.

Crystals were modelled according to the experimental short-range order para-

meters. In comparison with random alloys, those local atomic configurations are preferred which are compatible with an  $L1_2$  superstructure containing antiphase boundaries. This is corroborated by a Monte-Carlo simulation for a stoichiometric  $\text{Cu}_3\text{Zn}$  alloy using the experimental pair interactions.  $D0_{23}$ , an  $L1_2$ -based long-periodic superlattice, is found as the probable low-temperature phase. The transition temperature to the  $\alpha$  solid solution was estimated to be 330 K.