

Фрименом и Ватсоном [7] рассчитано эффективное сверхтонкое поле на ядре  $^{89}\text{Y}$ , возникающее за счет обменной поляризации электронов заполненных  $s$ -оболочек, обусловленной спиновой плотностью неспаренных  $4d$ -электронов (примерно 375 кЭ на один неспаренный электрон). Считая, что СТ поле на ядре  $^{89}\text{Y}$  обусловлено преимущественно заполнением  $4d$ -оболочки, можно оценить долю нескомпенсированных  $4d$ -электронов величиной  $\sim 0.05$ . Отметим, что близкие значения получены для степени заполнения электронами с нескомпенсированным спином номинально пустых  $5d$ - или  $6p$ -орбиталей иона  $\text{Vi}^{3+}$  в додекаэдрических узлах иттриевого феррита-граната [6].

#### Список литературы

- [1] Le Dang Khoi, Veillet P. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 7. P. 3218—3223.
- [2] Hosoe Y., Takamashi K., Hiroshi Y., Suzuki R., Sugita Y., Chikazumi S. // J. Phys. Soc. Jap. 1986. V. 55. N 3. P. 731—734.
- [3] Gonano R., Hunt E., Meyer H. // Phys. Rev. 1967. V. 156. N 2. P. 521—533.
- [4] Ковтун Н. М., Котельва А. М., Москвин А. С., Шемяков А. А. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 4. С. 1459—1466.
- [5] Borodin V. A., Doroshev V. D., Tarasenko T. N., Savosta M. M., Novák P. // J. Phys.: Condens. Matter. 1991. V. 3. P. 5881—5892.
- [6] Novák P. // Czech. J. of Phys. 1988. V. B38. N 10. P. 1146—1155.
- [7] Ватсон Р., Фримен А. // Сверхтонкие взаимодействия в твердых телах: Пер. с англ. М., 1970. 368 с.

Донецкий физико-технический институт  
АН Украины

Поступило в Редакцию  
30 июля 1992 г.

© Физика твердого тела, том 35, № 1, 1993  
Solid State Physics, vol. 35, N 1, 1993

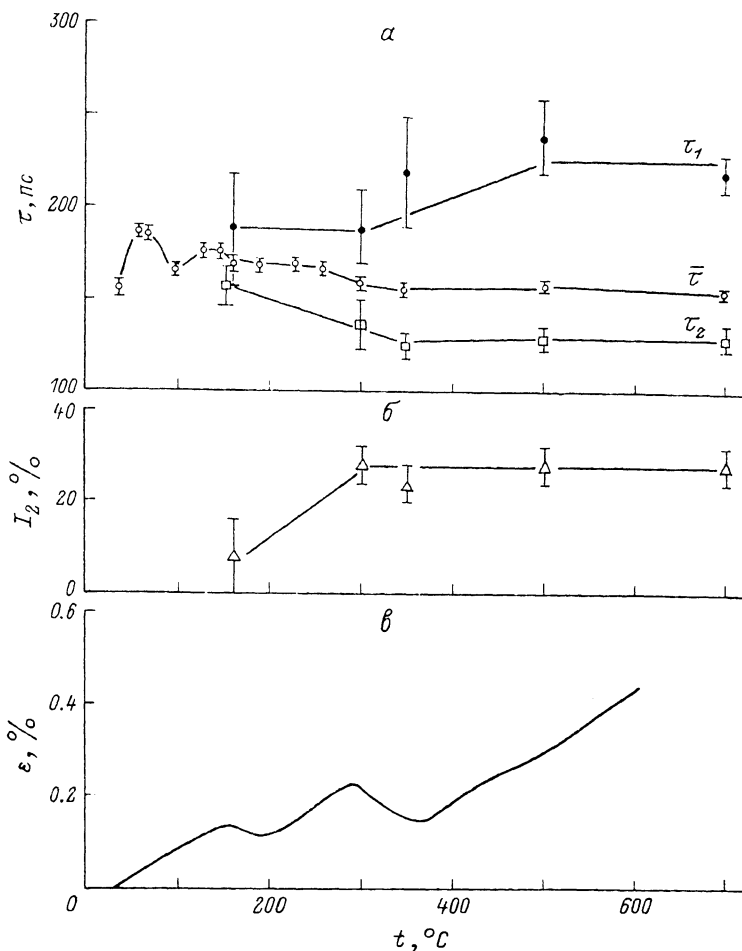
## ВРЕМЯ ЖИЗНИ ПОЗИТРОНОВ В ЦЕМЕНТИТЕ

А. Н. Жихарев, Д. Е. Капуткин, М. А. Штремель

В различных карбидах железа хорошо изучена координация [1], но плохо изучены ее причины — различия в электронной плотности. Применение прямого метода — измерения времени жизни позитронов — затруднено тем, что карбиды метастабильны и их выделение в чистом виде обычно сопровождается превращениями. Возможно только деление спектра сплава на две компоненты:  $\tau_1$  — для времени жизни в феррите,  $\tau_2$  — в карбиде. При этом отнести наблюдаемое  $\tau_2$  ко времени жизни позитронов либо в карбиде, либо на границе феррит—карбид можно, сравнив интенсивности  $I_2$  при разных размерах частиц, но неизменной объемной доле карбида  $\alpha_2$ .

Исследованы сплавы с 1.14% С (Y11,  $\alpha_2=0.17$ ) и 1.95 мас.% С (Y20,  $\alpha_2=0.29$ ). Образцы размерами  $(14-16) \times (15-20) \times (1.2-1.7)$  мм после аустенитизации  $1150^\circ\text{C}$ , 45 мин закаливали из откачанных кварцевых ампул в воде, охлаждали в жидком азоте, отпускали в вакууме и шлифовали. Режимы отпуска выбраны после дилатометрического исследования. Образцы для него размерами  $10 \times 2.5 \times 2.5$  мм также закаливали, охлаждали в жидком азоте и нагревали со скоростью  $5^\circ/\text{мин}$  при записи 500:1 в дилатометре Sinku—Riko DL-1500.

На дилатограмме отпуска  $\sigma$  (см. рисунок) к  $500^\circ\text{C}$  нелинейные изменения длины прекращаются: превращения карбидов завершены, остался лишь цементит. Выше  $500^\circ\text{C}$  идет его коагуляция.



Изменения компонент спектра времен жизни позитронов в стали Y11 с температурой отпуска (выдержки при 300 и 350 °C — 5 мин, при 500 °C — 60 мин, при 700 °C — 30 мин) (а), их относительной интенсивности (б) и дилатограмма нагрева со скоростью 5 °C / мин (в).

Время жизни позитронов по разностной методике [2] измерено с выделением  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  по центрам тяжести положительной и отрицательной полуволи, площади под кривой и ширине второй полуволи разностного спектра методом выбора направлений нульмерной трехпараметрической оптимизации [3], чтобы исключить вклад аннигиляции позитронов в деталях установки. При разрешении  $FWHM = 340-360$  пс набрано по 10—15 спектров на точку при  $2 \cdot 10^5$  импульсов на спектр в 1024 канала шириной 35 пс (источник  $^{22}\text{Na}$  активностью 3.7 МБк, скорость совпадений  $\sim 1$  кГц). Эталоном служили железо зонной очистки  $\bar{\tau}_{\text{ЭТ1}} = 115$  пс и закаленный сплав N16M6  $\bar{\tau}_{\text{ЭТ2}} = 165$  пс.

После отпуска 700 °C, 30 мин в стали Y11 время жизни позитронов в феррите  $\tau_1 = 135 \pm 5$  пс, а в Y20  $\tau_1 = 136 \pm 6$  пс, вторые компоненты  $\tau_2 = 221 \pm 11$  и  $236 \pm 21$  пс,  $I_2 = 27 \pm 5$  и  $39 \pm 5\%$  соответственно, т. е. времена  $\tau_2$  в двух сталях значимо не различаются, а интенсивности  $I_2$  относятся примерно как объемные доли  $\alpha_2$ . Чтобы проверить, не является ли  $\tau_2$  временем жизни позитронов на границе фаз феррит—цементит, измерили  $\tau_2$  также в Y11 после

отпуска 500 °С, 1 ч, где, по электронно-микроскопическим данным, частицы цементита имели диаметр 0.02 мкм (против 0.3 мкм после отпуска 700 °С, 30 мин), т. е. плотность границ феррит—цементит была выше в 15 раз. Здесь также  $\tau_1 = 130 \pm 6.5$ ,  $\tau_2 = 243 \pm 19$  пс и интенсивность  $I_2 = 28 \pm 5\%$ . Таким образом,  $\tau_2$  — время жизни позитронов именно в объеме цементита, а не на его границах. Объединенная по этим трем измерениям (с весами, обратными дисперсиям) оценка времени жизни в цементите  $\tau_2 = 233 \pm 17$  пс. Такая же оценка для феррита дает  $\tau_1 = 134 \pm 4$  пс против  $\tau = 135 \pm 5$  пс в железе технической чистоты [4].

Судя по зависимости компонент времени жизни позитронов в  $\gamma\text{Fe}$  от температуры отпуска (см. рисунок, а, б), после отпуска 300 °С, 5 мин время жизни позитронов в «промежуточном» карбиде  $184 \pm 22$  пс значительно меньше, чем в цементите. Существенно, что, несмотря на близкую плотность [1] и содержание углерода, «промежуточный» карбид, судя по разнице во временах жизни позитронов, сильно отличается от цементита распределением электронной плотности. Наблюдения ядерного гамма-резонанса [5, 6] и аннигиляции позитронов здесь взаимодополняющие, так как ЯГР реагирует на электронную плотность на узле решетки, а аннигиляция — в междоузлиях.

Главный вопрос: почему позитрон живет в цементите почти вдвое дольше, чем в ОЦК железе, хотя позиции с наименьшей электронной плотностью по конфигурации и размерам в них почти одинаковы? Действительно, в ОЦК железе местом накопления позитронов должен быть центр октаэдрического междоузлия, наиболее удаленный от всех атомов железа. Окружающие его шесть атомов железа образуют неправильный октаэдр. Октаэдры почти такой же формы и объема образуют и атомы железа в цементите. В половине таких октаэдров находится углерод, остальные — пустые [7]. Но почти тот же «пустой» октаэдр из атомов железа, будучи включен в решетку цементита, имеет в своем центре, видимо, много меньшую плотность электронов.

Причина видна из сопоставления объема на атом углерода [8]: в ОЦК и ГЦК железе, в цементите и промежуточных карбидах углерод занимает центр почти одинакового С-октаэдра. Но парциальный объем углерода скачком уменьшается, когда С-октаэдры соприкоснутся и каждый атом железа в вершине октаэдра будет связан с двумя атомами углерода. В цементите все атомы железа включены в такие цепи С—Fe—С, а в промежуточных карбидах — некоторые из них [8]. Тогда рост времени жизни позитрона от 134 пс в ОЦК железе до 184 пс в промежуточном карбиде и до 233 пс в цементите допускает простую кристаллохимическую интерпретацию: электронная плотность в центре «пустого» Fe-октаэдра резко падает, когда каждый из атомов Fe в его вершинах будет связан с двумя атомами углерода. В промежуточных карбидах независимо от деталей решетки не все атомы Fe включены в цепи С—Fe—С и соответственно электронная плотность в наибольшем междоузлии и время жизни позитрона в нем промежуточные между Fe и Fe<sub>3</sub>C.

#### Список литературы

- [1] Гольдшмидт Х. Дж. Сплавы внедрения. Т. 1. М.: Мир, 1971. С. 170.
- [2] Валуев Н. П., Жихарев А. Н. // ПТЭ. 1985. № 5. С. 43—44.
- [3] Карманов В. Г. Математическое программирование. М.: Наука, 1986. 288 с.
- [4] Жихарев А. Н., Каменецкая Д. С., Мойш Ю. В., Ширяев В. И., Шербединский Г. В. // Металлофизика. 1989. Т. 11. № 5. С. 76—79.
- [5] Максимов Ю. В., Суздаев И. П., Аренц Р. А. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 11. С. 3344—3347.

- [6] Кутсар А. Р., Родионов Ю. Л., Зимин В. И., Исфандияров Г. Г. // ФММ. 1980. № 3. С. 644—647.  
 [7] Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. Ч. 2 М. Мир, 1977. 472 с.  
 [8] Штремель М. А., Капуткина Л. М., Прокошкин С. Д., Капуткин Д. Е., Чусов С. Ю. // ФММ. 1992. № 5. С. 25—33.

Московский институт  
 стали и сплавов

Поступило в Редакцию  
 30 июля 1991 г.  
 В окончательной редакции  
 3 августа 1992 г.

© Физика твердого тела, том 35, № 1, 1993  
 Solid State Physics, vol 35, № 1, 1993

## ГИСТЕРЕЗИСНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СКОРОСТИ ЗВУКА В ОБЛАСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ НЕСОРАЗМЕРНОЙ СУПЕРИОННОЙ ФАЗЫ КРИСТАЛЛА $\text{LiKSO}_4$

Б. Ф. Борисов, Т. Краевский, А. К. Раджабов, Е. В. Чарнак

Кристалл литий-калиевого сульфата  $\text{LiKSO}_4$  относится к многочисленной группе кристаллов, имеющих фазу прототипа со структурой  $\alpha\text{-K}_2\text{SO}_4$ . Многие представители этого класса переходят в несоразмерную фазу как при низких, так и при высоких температурах. Особенностью  $\text{LiKSO}_4$  являются фазовые переходы при высокой температуре из парафазы сначала в состояние с соразмерной, а затем — с несоразмерной модуляцией [1,2], в котором кристалл одновременно является сегнетоэластиком [3,4] и суперионником [5,6]. К настоящему времени не имеется однозначных данных относительно точных температур высокотемпературных фазовых переходов, а также относительно симметрии кристалла в модулированной фазе [7].

По наиболее поздним данным переход в соразмерную сегнетоэластическую фазу происходит при  $T_c = 708$  К, в несоразмерную фазу — при  $T_{ci} = 743$  К и фазу прототипа — при  $T_i = 943$  К [1,5]. В области температур между комнатной и  $T_c$   $\text{LiKSO}_4$  имеет гексагональную симметрию 6 [8,9]. Наиболее вероятной симметрией при  $T_c < T < T_i$  является ромбическая  $mmm$  [5,10]. Сочетание сегнетоэластических и суперионных свойств с несоразмерной структурой может привести к необычному поведению акустических параметров в высокотемпературной области, что делает акустические исследования особенно интересными. Однако измерения температурных зависимостей модулей упругости методом мандельштам-бриллюэновского рассеяния никаких аномалий, присущих несоразмерной фазе, не выявили [5].

В настоящей работе приводятся результаты исследований температурной зависимости скоростей продольных акустических волн, распространяющихся вдоль двух взаимно-перпендикулярных направлений кристалла  $\text{LiKSO}_4$ , соответствующих кристаллофизическим осям  $z$  и  $y$  гексагональной фазы в диапазоне температур 300—930 К. Измерения  $\Delta v^i/v_0^i = [v^i(T) - v^i(T = 300 \text{ К})]/v^i(T = 300 \text{ К})$  ( $i = x, y, z$ ) проводились импульсно-фазовым методом [11,12] на частоте 7 МГц. Исследуемый образец помещался между двумя достаточно длинными, выходящими за пределы термостатирующей камеры, звукопроводами, к внешним торцам которых приклеивались пьезопреобразователи из кварца или ниобата лития. Контакт между образцом и звукопроводом внутри термостата осуществлялся без склейки (так называемый оптический контакт) за счет прижима атмосферным давлением. Точность относительных измерений скорости составляла