

УДК 539.266

**РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПЛАВОВ Al—Ge
В ШИРОКОМ ТЕМПЕРАТУРНО-КОНЦЕНТРАЦИОННОМ ИНТЕРВАЛЕ****О.М. Яковенко, В.П. Казимиров, А.С. Роик, Н.В. Головатая, С.П. Ялтанский,
В.Э. Сокольский***Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Украина*
E-mail: 3_14@ukr.net, kazimirov@univ.kiev.ua*Статья поступила 20 ноября 2014 г.*

Проведено рентгенодифракционное исследование структуры расплавов Al—Ge с содержанием 0, 10, 20, 30,3, 40, 50, 60, 70, 80 и 100 ат.% Ge вблизи линии ликвидус и при 1273 К. Расплавы с содержанием 40, 70 и 80 ат.% Ge исследованы в температурном интервале до 1823 К. Характерной особенностью кривых структурного фактора (СФ) исследованных расплавов является наличие наплыва на высокоугловой ветви первого максимума при содержании более 20 ат.% Ge, положение которого совпадает с наплывом на кривой СФ жидкого германия. Повышение температуры приводит к постепенному сглаживанию наплыва вследствие увеличения структурной однородности расплавов, обусловленного металлизацией остаточных ковалентных связей между атомами германия. Установлено микронеоднородное строение расплавов при содержании германия выше 20 ат.%, определяемое сосуществованием микрогруппировок жидкого германия и расплава с содержанием 20 ат.% Ge, что позволяет удовлетворительно описать экспериментальные кривые СФ в концентрационном интервале 20—100 ат.% Ge при температуре вблизи линии ликвидус.

DOI: 10.15372/JSC20160113

Ключевые слова: расплав Al—Ge, микрогетерогенная структура, рентгеновская дифракция, ближний порядок.**ВВЕДЕНИЕ**

Сплавы Al—Ge относятся к системе простого эвтектического типа (28,6 ат.% Ge, 690 К) с ограниченной растворимостью компонентов [1]. При быстром охлаждении расплавов с различной скоростью зафиксировано образование в затвердевших образцах ряда метастабильных фаз разного состава и разной структуры [2—7]. Общим результатом является расширение области твердого раствора на основе алюминия до ~7,2 ат.% Ge. Несогласованность данных по структуре метастабильных фаз, представленных в указанных работах, обусловлена технологическими сложностями и многопараметричностью процесса закалки расплава. Тем не менее в исследованиях [5—7] получены практически совпадающие результаты, которые в дальнейшем были подтверждены в работе [8] для ромбоэдрической и моноклинной фаз. Метастабильные фазы в системе Al—Ge зафиксированы и при воздействии высокого давления [9—11]. В работе [9] при термобарической обработке твердых сплавов (9 ГПа, 593 К) получена γ -фаза состава $Al_{30}Ge_{70}$ (ат.%) с простой гексагональной решеткой ($a = 2,83$, $c = 2,622$ Å) и атомной координатой 8, которая сохраняется при 77 К и нормальном давлении. Область твердого раствора на основе алюминия при 10 ГПа расширяется до ~18 ат.% Ge с параллельным повышением

температуры перехода сплавов в сверхпроводящее состояние до $\sim 7,2$ К [10]. Аналогичный эффект зафиксирован и для γ -фазы при 8,2 К [9]. Образование метастабильной γ -фазы гексагональной сингонии в интервале 2,5—8 ГПа с последующим переходом в аморфное состояние установлено в работе [11]. Повышение давления, кроме расширения области твердых растворов на основе алюминия и германия, приводит к заметному сдвигу эвтектической точки на фазовой диаграмме в область составов богатых германием и незначительному увеличению температуры эвтектики [12, 13].

Изменения фазового состава в сплавах Al—Ge при воздействии высокого давления обусловлены постепенной металлизацией ковалентных связей германия с одновременным формированием более плотноупакованных и высококоординированных структур характерных для типичных металлов [14]. При этом значение металлического радиуса атома Ge (1,37 Å) для координационного числа 12 оказывается близким к значению радиуса атома Al (1,43 Å) [15], что соответствует условию образования широкой области твердых растворов.

При плавлении германия также происходит металлизация sp^3 -ковалентных связей [16], что приводит к возникновению электрической проводимости на уровне жидкого свинца, увеличению плотности упаковки атомов, ближайшего координационного числа, ближайшего межатомного расстояния ($R_1 = 2,66$ Å), заметно превышающего длину ковалентной связи твердого германия (2,45 Å). Таким образом, жидкий германий ведет себя как типичный металл. Результатом этих изменений является усиление взаимодействия между разноразновидными атомами в расплавах Al—Ge, что приводит к небольшим отрицательным значениям энтальпии смешения [17]. Моделирование термодинамических свойств связывает этот эффект с наличием в расплавах слабых ассоциатов состава Al_2Ge_3 [18] и необходимостью учета сил притяжения в бинарной смеси твердых сфер [19], что приводит к более упорядоченному расположению атомов по сравнению с хаотическим.

Следовательно, плавление и воздействие высокого давления приводят к металлизации межатомных связей жидкого и твердого германия соответственно, что объясняет появление метастабильных фаз при закалке бинарных расплавов и при действии высокого давления на твердые сплавы. При этом степень металлизации межатомных связей твердого германия зависит от величины давления, и координационное число 12 достигается при $P \geq 125$ ГПа (плотная гексагональная упаковка) [14]. Подобная ситуация реализуется и в жидком германии. При интерпретации результатов дифракционных исследований предполагается частичное сохранение ковалентной связи в жидком германии [20—23]. В работе [20] для описания сложной формы первого максимума СФ (наплыв на высокоугловой ветви) использована модель, предполагающая наличие в расплаве двух различных типов упорядочения атомов — одна часть существует в виде изолированных атомов и ведет себя как твердосферная жидкость; вторая часть образует ковалентно связанные молекулярные агрегаты с тетраэдрическим окружением атомов. Модель хорошо описывает экспериментальные кривые СФ германия при 1233 и 1573 К. Малая глубина первого минимума функции парного распределения атомов (ФПРА) с небольшим пиком в области 4 Å увязывается с частичным сохранением в расплаве атомного упорядочения, характерного для твердого германия [21]. Действительно, вторая координационная сфера в структуре твердого германия ($Fd\bar{3}m$) находится на расстоянии $R_2 = 4,00$ Å и соответствует длине ребра тетраэдра, образованного ковалентно связанными атомами. Альтернативный подход объясняет сложную структуру жидкого германия специфической формой межатомного потенциала — наличием перегиба на отталкивающей ветви, обусловленного двумя характерными расстояниями: диаметром жесткой сердцевинки иона, определяющего положение минимума потенциала, и длиной волны фриделевских осцилляций, связанной с электронной плотностью [23, 25]. При высокой электронной плотности происходит перекрывание фриделевских осцилляций с минимумом потенциала с его последующим вырождением в перегиб на отталкивающей ветви потенциала, что приводит к стабилизации низкокоординированных структур в твердом и жидком состояниях. Сложная форма первого максимума также удовлетворительно описывается с использованием отталкивающего потенциала Зильберта—Янга [26, 27], что коррелирует с вышепри-

веденными результатами. Экспериментальное подтверждение рассмотренного подхода получено в работе [28], где показано, что валентные электроны в жидком германии в большей степени задействованы в процессе экранирования ионов, чем в организации ковалентных связей. Результаты молекулярно-динамического моделирования подтверждают наличие ковалентной связи в жидком германии [29, 30].

Исследование структуры жидких сплавов Al—Ge с содержанием 20, 40, 60 и 80 ат.% Ge нейтронографическим методом при 1250 К представлено в работе [26]. Основное внимание авторы уделили описанию кривых СФ бинарной смесью твердых сфер с привлечением потенциала Зильберга—Янга.

Учитывая вышеизложенное, нами было проведено рентгенографическое исследование расплавов Al—Ge в широком температурно-концентрационном интервале с целью выявления возможных физических причин, влияющих на формирование структуры и свойств расплавов, а также их взаимосвязи с характером межатомного взаимодействия в твердом состоянии.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исследуемые образцы были получены сплавлением чистого алюминия (марка А999) и монокристаллического зонноочищенного германия в дуговой печи в аргоновой атмосфере. Кривые интенсивности (КИ) рассеянного расплавом излучения были получены на автоматическом θ — θ дифрактометре в диапазоне углов рассеяния 6—90° с шагом 15' для интервала 6—50° и 30' для 50—90° с использованием MoK_{α} -излучения, монохроматизированного сбалансированными дифференциальными фильтрами Zr—Y, расположенными на дифрагированном пучке. Для образцов с содержанием 0, 10, 20, 30,3, 40, 50, 60, 70, 80 и 100 ат.% Ge эксперимент проводился при температуре на ~50 К выше температуры плавления и при 1273 К в атмосфере гелия; для расплавов с содержанием 40, 70 и 80 ат.% Ge кривые рассеяния получены при нагреве до 1823 К. При обработке экспериментальных КИ проводили сглаживание данных с последующей интерполяцией по методу Ньютона с шагом 0,25° по всему угловому интервалу; нормировку полученных данных проводили по закону сохранения интенсивности с учетом дисперсионных поправок в атомных факторах [31, 32], угловой зависимости интенсивности некогерентного рассеяния [33] и поляризации рассеянного излучения. Функцию парного распределения атомов рассчитывали по уравнению [34]:

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 r \rho_0 \left(\sum n_i K_i\right)^2} \int_{s_1}^{s_2} s [a(s) - 1] \sin(sr) ds, \quad (1)$$

где ρ_0 — плотность расплава; $a(s)$ — структурный фактор; $s = 4\pi \sin\theta/\lambda$ — значение вектора дифракции (θ — половина угла рассеяния, λ — длина волны излучения); n_i — атомная доля; K_i — относительная рассеивающая способность атомов i -го компонента.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанные кривые СФ ($a(s)$) и функций парного распределения атомов $g(r)$ для расплавов вблизи линии ликвидус и при 1273 К представлены на рис. 1, структурные параметры кривых при указанных и более высоких температурах, в частности, положение (s_1) и высота ($a(s_1)$) первого пика кривых СФ, положение (R_1) и высота ($g(R_1)$) первого максимума функций парного распределения атомов приведены в табл. 1.

При увеличении содержания германия наблюдается монотонное смещение положения первого максимума в область меньших значений вектора рассеяния, уменьшение ближайшего расстояния между атомами, заметное снижение высоты первых пиков СФ и ФПРА. Для расплава с содержанием 20 ат.% Ge проявляется асимметрия, а при более высоких концентрациях — заметный наплыв на высокоугловой ветви первого максимума СФ, совпадающего по положению с соответствующим наплывом на кривой СФ жидкого германия. На кривых ФПРА при содержании германия выше 50 ат.% присутствует небольшой максимум при ~3,9 Å, что согласуется

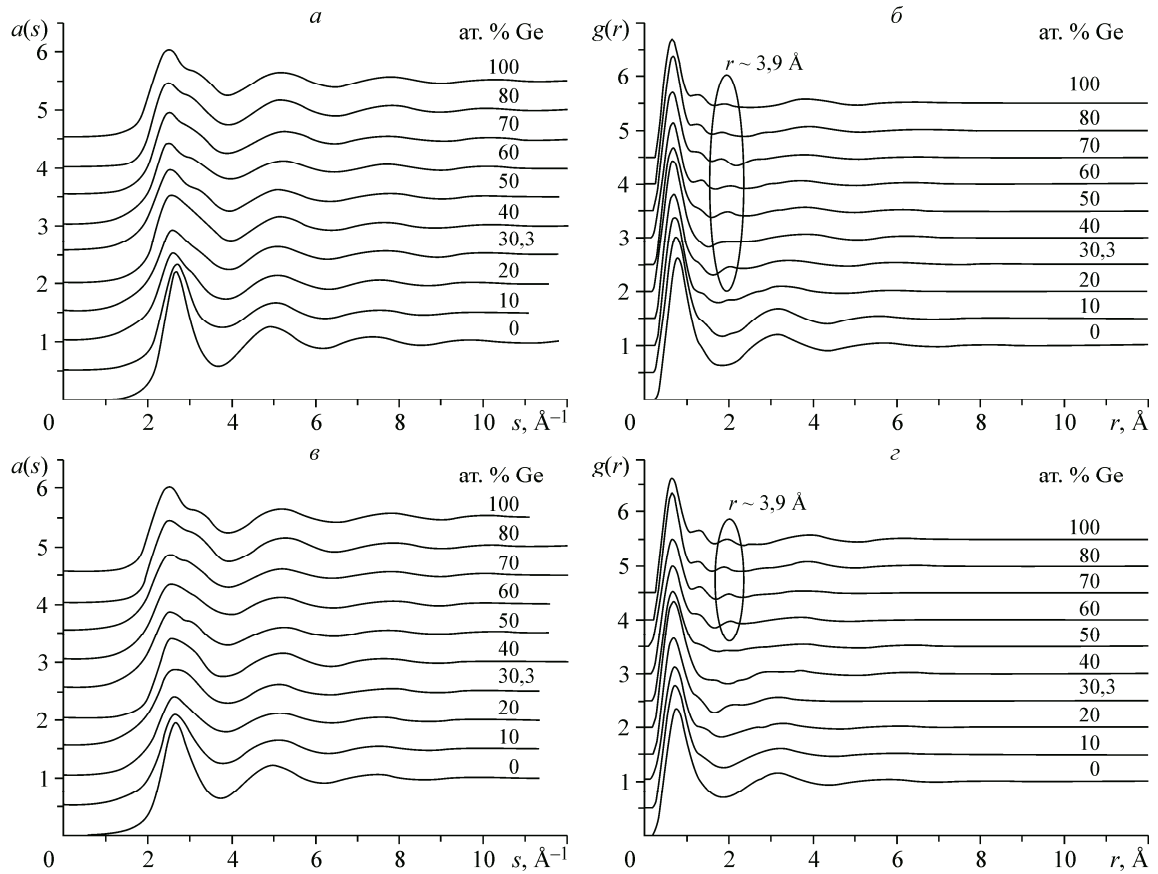


Рис. 1. Кривые СФ и ФПРА для расплавов Al—Ge вблизи температуры линии ликвидус (а, б) и при 1273 К (в, г)

Т а б л и ц а 1

Структурные параметры расплавов Al—Ge

$\chi(\text{Ge}), \text{ ат. \%}$	$T \pm 5 \text{ K}$	s_1 $\pm 0,02 \text{ \AA}^{-1}$	$a(s_1)$	R_1 $\pm 0,02 \text{ \AA}$	$g(R_1)$	$\chi(\text{Ge}), \text{ ат. \%}$	$T \pm 5 \text{ K}$	s_1 $\pm 0,02 \text{ \AA}^{-1}$	$a(s_1)$	R_1 $\pm 0,02 \text{ \AA}$	$g(R_1)$
0	973	2,67	2,21	2,79	2,61	60	1040	2,49	1,44	2,67	2,15
	1273	2,68	1,96	2,77	2,36		1273	2,56	1,34	2,67	2,01
	1773	2,69	1,86	2,76	2,40		70	1123	2,51	1,46	2,66
10	900	2,68	1,83	2,75	2,51	1273		2,53	1,36	2,68	2,01
	1273	2,66	1,60	2,74	2,28	1473	2,51	1,38	2,64	2,03	
20	818	2,60	1,53	2,72	2,38	1773	2,59	1,41	2,65	1,91	
	1273	2,63	1,41	2,73	2,12	75*	1143	2,52	1,54	2,66	2,66
30,3	747	2,59	1,43	2,69	2,31		80	1173	2,49	1,47	2,67
	1273	2,65	1,36	2,69	2,17	1273		2,52	1,45	2,66	2,34
40	853	2,56	1,53	2,68	2,43	90*	1523	2,52	1,42	2,67	2,13
	1273	2,59	1,40	2,70	2,35		1773	2,63	1,42	2,67	1,99
	1503	2,61	1,48	2,65	2,29		1223	2,51	1,55	2,66	2,19
	1773	2,69	1,35	2,65	2,27		100	1233	2,51	1,55	2,66
45*	913	2,55	1,53	2,68	2,34	1273		2,50	1,52	2,66	2,13
50	968	2,53	1,48	2,68	2,18	1773	2,61	1,42	2,66	2,11	
	1273	2,53	1,36	2,68	2,03						

* Значения для смоделированных кривых.

с указанным ранее значением $4,0 \text{ \AA}$ для радиуса второй координационной сферы кристаллического германия и идентифицирует наличие элементов ковалентной связи между атомами германия. Следовательно, в расплавах Al—Ge проявляются особенности структуры жидкого германия, обуславливая довольно необычную концентрационную зависимость R_1 с сильным отрицательным отклонением от аддитивности, что не характерно для расплавов систем эвтектического типа. Здесь следует учитывать тот факт, что интенсивность рассеяния рентгеновских лучей на атомах германия существенно выше, чем на атомах алюминия, определяя его приоритетное влияние на формирование структуры расплавов Al—Ge и концентрационную зависимость структурных параметров. Например, в выражении для суммарного структурного фактора расплава эквиатомного состава парциальный СФ $a_{\text{GeGe}}(s)$ входит с коэффициентом 0,45, а $a_{\text{AlAl}}(s)$ с коэффициентом 0,05. Особенности формы первого пика СФ в виде плеча на высокоугловой ветви при содержании алюминия более 60 ат.% выявлены и в работе [26]. Таким образом, результаты проведенного исследования дают возможность говорить о микронеоднородном (квазиэвтектическом) строении расплавов Al—Ge.

Для проверки этого предположения была использована микронеоднородная модель, предполагающая наличие в расплавах в определенном концентрационном интервале микрогруппировок атомов двух типов, рассеяние рентгеновского излучения на которых происходит независимо [35]. Микронеоднородная модель позволяет описать экспериментальные кривые $a(s)$ расплавов промежуточных составов с помощью экспериментальных кривых СФ для базовых микрогруппировок, используя уравнение

$$a(s) - 1 = \frac{l_1 - n_1}{l_1 - m_1} \cdot \frac{K_1^2}{K_{1m}^2} \cdot (a_m(s) - 1) + \frac{n_1 - m_1}{l_1 - m_1} \cdot \frac{K_1^2}{K_{1l}^2} \cdot (a_l(s) - 1), \quad (2)$$

где $a_l(s)$, $a_m(s)$ — кривые СФ для микрогруппировок l -го и m -го типов; n_1 , l_1 , m_1 — содержание первого компонента в расплаве и микрогруппировках указанных типов соответственно; K_1 , K_{1l} , K_{1m} — относительная рассеивающая способность атомов первого компонента в расплаве и микрогруппировках. Исходя из анализа экспериментальных данных, в качестве одной из составляющих микронеоднородной структуры расплавов Al—Ge были использованы микрогруппировки со структурой жидкого германия. Вторую составляющую определяли путем оптимизации модели к экспериментальным данным с использованием ур. (2). Наилучшая сходимость с экспериментальными кривыми СФ вблизи линии ликвидус в концентрационном интервале 20—100 ат.% Ge достигается при использовании в качестве микрогруппировок расплава с содержанием 20 ат.% Ge, что соответствует области твердого раствора германия в алюминии при давлении 10 ГПа [10]. Полученное соответствие предполагает наличие хаотического распределения атомов в расплавах в интервале 0—20 ат.% Ge. Значения фактора сходимости между экспериментальными ($a^E(s_i)$) и модельными ($a^M(s_i)$) кривыми СФ были рассчитаны по уравнению:

$$f_c^2 = \sum_i \frac{(a^E(s_i) - a^M(s_i))^2}{\sigma^2(s_i)} \quad (3)$$

и приведены в табл. 2; величина $\sigma^2(s_i)$ — стандартное отклонение нормального распределения для экспериментального структурного фактора. Наибольшее различие, как видно, наблюдается для расплава с 40 ат.% Ge, но даже в этом случае достигается удовлетворительное воспроизведение экспериментальных особенностей кривых СФ (рис. 2). Дополнительно были рассчитаны

Т а б л и ц а 2

Фактор сходимости f^2 для рассчитанных кривых СФ расплавов Al—Ge

$\chi(\text{Ge}), \text{ ат.}\%$		30,3	40	50	60	70	80
f_c^2	Вблизи линии ликвидус	38	117	57	77	82	80
	1273 К	57	161	95	106	91	83

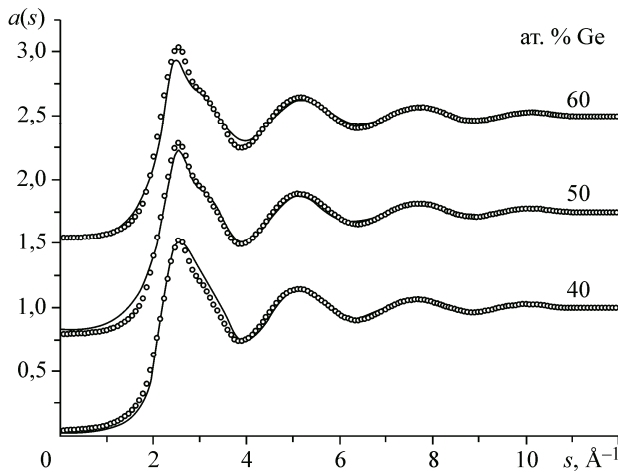


Рис. 2. Экспериментальные (○) и модельные (—) кривые СФ для расплавов Al—Ge

кривые для расплавов с содержанием 45, 75 и 90 ат.% Ge и соответствующие им структурные параметры. Полученные значения хорошо согласуются с концентрационными зависимостями s_1 и R_1 (рис. 3), рассчитанных из экспериментальных данных, что подтверждает корректность используемой модели и ее составляющих. Важным результатом проведенного анализа является установление корреляции между характером взаимодействия атомов в твердом и жидком состояниях, сви-

детельствующее о наличии элементов направленной связи между атомами германия в расплавах Al—Ge. Вместе с тем расширение области однородного раствора на основе алюминия является прямым следствием металлизации ковалентных связей при плавлении германия.

При увеличении температуры бинарных расплавов наблюдается постепенное размывание наплыва на высокоугловой ветви первого максимума СФ и его смещение в высокоугловую область, а также уменьшение интенсивности первого максимума на кривых ФПРА (рис. 4). Интенсивность пика при $3,9 \text{ \AA}^{-1}$ на кривой ФПРА уменьшается и исчезает при нагреве до 1503, 1773 и 1823 К для составов с 40, 70 и 80 ат.% Ge соответственно, что свидетельствует об увеличении степени металлизации связей Ge—Ge и заметном уменьшении содержания микрогруппировок жидкого германия, следствием чего является более структурно однородное состояние расплавов. Косвенным подтверждением может служить увеличение значений фактора сходимости экспериментальных и модельных кривых СФ расплавов при 1273 К.

Для оценки взаимосвязи между результатами структурных исследований и термодинамическими свойствами расплавов был произведен расчет концентрационной зависимости величины среднеквадратичных флуктуаций концентрации $A_{cc}(0)$, которая непосредственно связана с характером межатомных взаимодействий в расплаве [36, 37]

$$A_{cc}(0) = Nk_B T / (\partial^2 \Delta G / \partial^2 C)_{T,p,N}, \quad (4)$$

где N — плотность числа частиц; k_B — константа Больцмана; ΔG — энергия Гиббса смешения.

Результаты расчетов, с использованием данных работы [38], представлены на рис. 5. Установлено, что повышение температуры не оказывает, в пределах ошибки эксперимента, заметного влияния на вид кривых $A_{cc}(0)$. Наблюдается небольшая тенденция к увеличению значе-

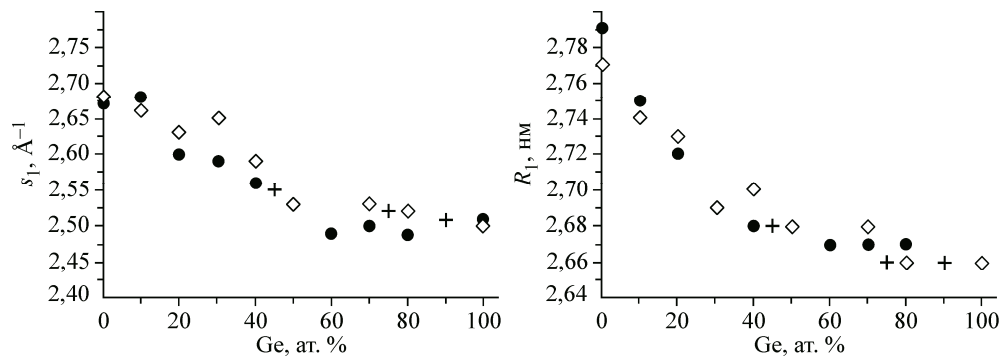


Рис. 3. Экспериментальные значения структурных параметров расплавов Al—Ge вблизи линии ликвидус (●), при 1273 К (◇) и рассчитанные для модельных составов (+)

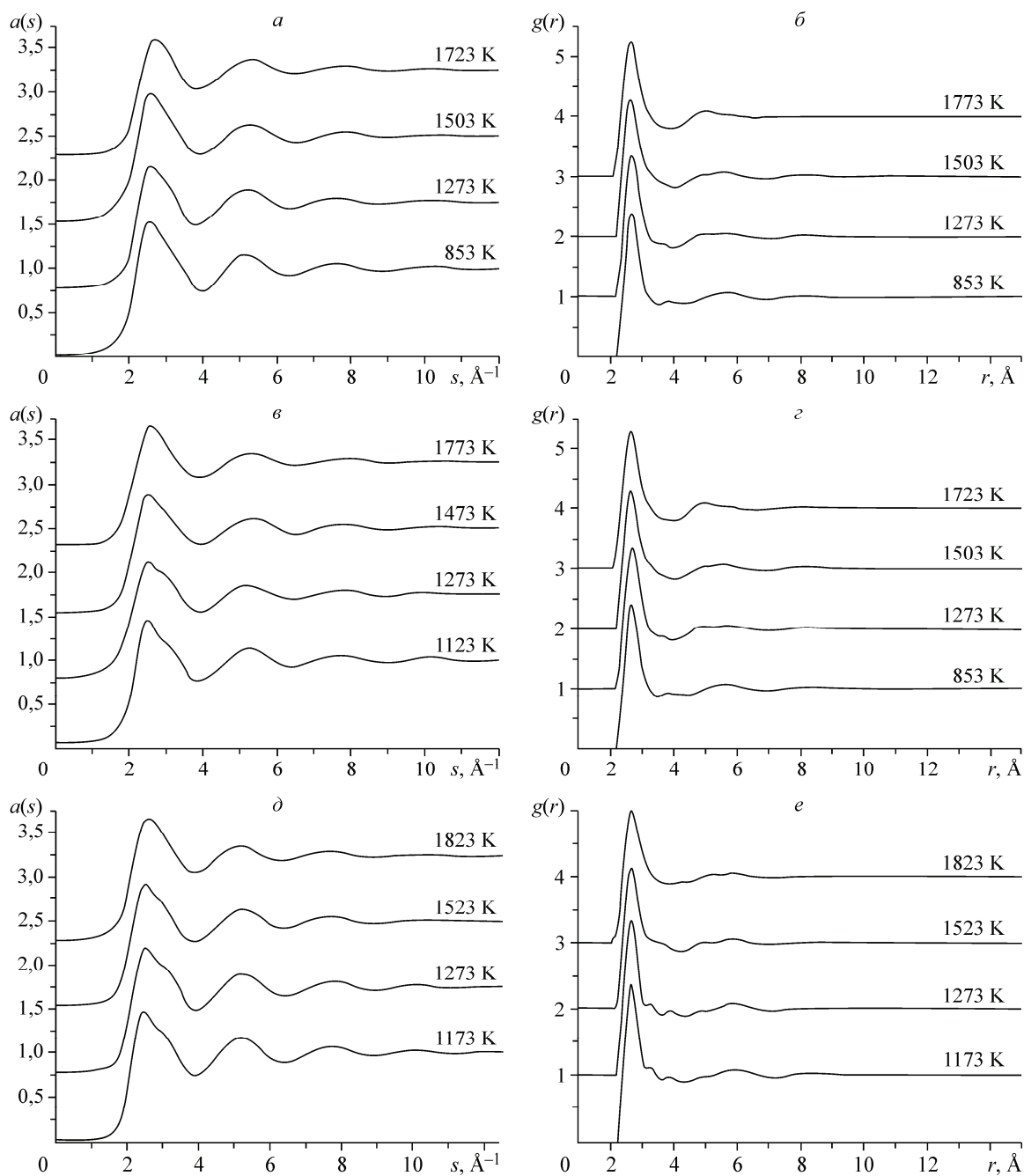


Рис. 4. Кривые СФ и ФПРА для расплавов Al—Ge с содержанием 40 (*a*, *б*), 70 (*в*, *г*), 80 (*д*, *е*) ат.% Ge при различных температурах

ний $A_{cc}(0)$, что отражает приближение состояния расплава к идеальному. Анализ концентрационной зависимости кривых $A_{cc}(0)$ (см. рис. 5) при разных температурах позволяет отнести систему Al—Ge к системам с преимущественным взаимодействием разноразных атомов [39]. Отрицательные значения избыточной свободной энергии и энтальпии смешения в системе можно объяснить усилением взаимодействия между атомами алюминия и германия при переходе сплавов из твердого состояния в жидкое, что, в свою очередь, обусловлено изменением характера химической связи при плавлении германия.

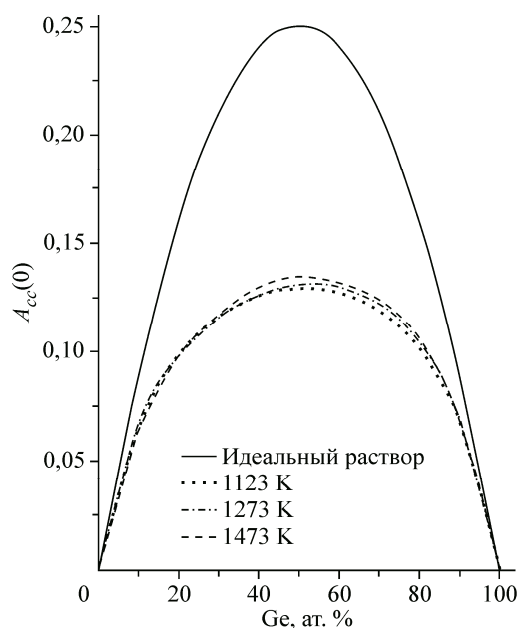


Рис. 5. Концентрационная зависимость $A_{cc}(0)$ расплавов системы Al—Ge

ВЫВОДЫ

Проведено исследование расплавов системы Al—Ge с содержанием германия 0—100 ат.% вблизи линии ликвидус и при 1273 К, а также в широком диапазоне температур для расплавов с содержанием 40, 70 и 80 ат.% Ge. Показано, что микронеоднородная модель, компонентами которой являются микрогруппировки жидкого германия и расплава с содержанием 20 ат.% Ge, позволяет удовлетворительно описать кривые СФ расплавов Al—Ge вблизи линии ликвидус в концентрационном интервале 20—100 ат.% Ge, подтверждая наличие структурного соответствия между сплавами в жидком и твердом состояниях. При нагревании расплава происходит металлизация остаточных ковалентных связей между

атомами германия и уменьшение содержания микрогруппировок со структурой жидкого германия. Совокупность полученных данных позволяет отнести расплавы Al—Ge к системам со слабым взаимодействием разноразмерных атомов, что обуславливает небольшие отрицательные отклонения термодинамических свойств расплавов от идеальности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Murray J.L., McAlister A.J. // Bull. Alloy Phase Diagram. – 1984. – 5, N 4. – P. 341.
2. Кушнерова А.К., Салли И.В. // Изв. АН СССР. Неорг. материалы. – 1970. – 6. – С. 1867.
3. Suryanarayana C., Anantharaman T.R. // J. Mater. Sci. – 1970. – 5. – P. 992.
4. Ramachandrarao P., Scott M.G., Chadwick G.A. // Phil. Mag. – 1972. – 25, N 4. – P. 961.
5. Köster U. // Acta Metall. – 1972. – 20. – P. 1361.
6. Köster U. // Z. Metallk. – 1972. – 63, N 8. – P. 472.
7. Kaufman M.J., Fraser H.L. // Acta Metall. – 1985. – 33, N 2. – P. 191.
8. Ojha S.N. // Mater. Sci. Engin. A. – 2001. – 304-306. – P. 114.
9. Баркалов О.И., Белаиш И.Т., Дегтярева В.Ф., Понятовский Е.Г. // Физика твердого тела. – 1987. – 29, № 7. – С. 1975.
10. Degtyareva V.F., Chipenko G.V., Belash I.T., Barkalov O.I., Ponyatovskii E.G. // Phys. Stat. Sol. (a). – 1985. – 89, N 2. – P. K127.
11. Yvon P.J., Schwarz R.B., Shiperl D., Johnson W.L. // Phil. Mag. Lett. – 1995. – 72, N 3. – P. 167.
12. Kagaya H.-M., Imazawa K., Sato M., Soma T. // Physica B. – 1998. – 245. – P. 252.
13. Xu R., Zhao H., Li J., Liu R., Wang W.K. // Mat. Lett. – 2006. – 60. – P. 783.
14. Tonkov E.Yu., Ponyatovsky E.G. Phase transformation of elements under high pressure. – CRC Press., 2005.
15. Pearson W.B. The crystal chemistry and physics of metals and alloys. – New York: Wiley Interscience, Inc., 1972.
16. Глазов В.М., Чижевская С.Н., Глаголева Н.Н. Жидкие полупроводники. – М.: Наука, 1967.
17. Eslami H. // J. Less-Common Met. – 1979. – 64, N 1. – P. 31.
18. Anusionwu B.C., Adebayo G.A., Madu C.A. // Appl. Phys. A. – 2009. – 97. – P. 533.
19. Ali I., Osman S.M., Singh R.N. // J. Non-Cryst. Solids. – 1999. – 250-252. – P. 321.
20. Gabathuler J.P., Steeb S. // Z. Naturforsch. A. – 1979. – 34, N 11. – P. 1314.
21. Waseda Y., Suzuki K. // Z. Phys. B. – 1975. – 20, N 4. – P. 339.
22. Казимиров В.П., Шовский В.А., Сокольский В.Э., Смык С.Ю. // Металлы. – 1996. – № 6. – С. 97.
23. Tosi M.P. // J. Phys.: Condens. Matter. – 1994. – 6. – P. A13.
24. Kahl G., Hafner J. // Solid State Commun. – 1984. – 49, N 12. – P. 1125.

25. Hafner J., Heine V. // J. Phys. F: Met. Phys. – 1983. – **13**. – P. 2479 – 2501.
26. Grosdidier B., Gasser J.G. // J. Non-Cryst. Solids. – 1999. – **250-252**. – P. 309.
27. Grosdidier B., Gasser J.-G. // Intermetallics. – 2003. – **11**. – P. 1253.
28. Kawakita Y., Fujita S., Kohara S., Ohshima K., Fujii H., Yokota Y., Takeda S. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. – 2005. – **238**. – P. 129.
29. Kulkarni R.V., Aulbur W.G., Stroud D. // Phys. Rev. B. – 1997. – **55**, N 11. – P. 6896.
30. Munejiri S., Masaki T., Itami T., Shimojo F. // Phys. Rev. B. – 2008. – **77**. – P. 014206.
31. Cromer D.T., Waber J.T. // Acta Cryst. – 1965. – **18**, N 5. – P.104.
32. Cromer D.T., Libermann D. // J. Chem. Phys. – 1970. – **53**, N 5. – P. 1891.
33. Bol W. // J. Sci. Instr. – 1967. – **44**, N 9. – P. 736.
34. Лашко А.С. // Журн. физ. химии. – 1959. – **33**, № 8. – С. 1730.
35. Романова А.В., Ильинский А.Г. // Укр. физ. журн. – 1974. – **19**, № 9. – С. 1565.
36. Bhatia A.B., Thornton D.E. // Phys. Rev. B.: Solid State. – 1970. – **2**, N 8. – P. 3004.
37. Бхатиа А.Б. В кн. Жидкие металлы. Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1980. – С. 27 – 47.
38. Баталин Г.И., Белобородова Е.А. // Журн. физ. химии. – 1968. – № 3. – С. 781.
39. Казимиров В.П. // Расплавы. – 1993. – № 3. – С. 91.