Письма в ЖЭТФ, том 104, вып. 8, с. 560 – 567  25 октября

# Когерентное кластерное упорядочение атомов в интерметаллиде Fe-27Al

*А. М. Балагуров*[+], *И. А. Бобриков*[+1)], *Б. Мухаметулы*[+], *С. В. Сумников*[+], *И. С. Головин*[*]

[+]*Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

[*]*Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", 119049 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 22 августа 2016 г.

В широком температурном диапазоне (20−900 °C) проведены нейтронные дифракционные исследования состава $Fe_{0.735}Al_{0.265}$ с целью определения его структурных состояний и механизма упорядочения атомов. Сочетание дифракции высокого разрешения и регистрации дифракционных спектров в режиме реального времени позволило установить, что вопреки традиционным представлениям структура этого состава при комнатной температуре представляет собой фазу, лишь частично упорядоченную в отношении расположения Fe и Al в элементарной ячейке. Полностью упорядоченная фаза (типа $Fe_3Al$) присутствует в виде когерентно встроенных в матрицу основной фазы мезоскопических по размерам (∼ 200 Å) кластеров. После перевода образца в неупорядоченное состояние ($T > 740$ °C) и медленного охлаждения до комнатной температуры размеры структурно упорядоченных кластеров увеличились до ∼ 900 Å. Высокий контраст по когерентным длинам рассеяния нейтронов ядрами железа и галлия позволил с хорошей точностью определить температурную зависимость факторов заполнения позиций атомами Fe и Al вплоть до фазового перехода в неупорядоченное состояние.

DOI: 10.7868/S0370274X16200042

**Введение.** Процессы упорядочения атомов в сплавах Fe–Al изучаются с 1930-х гг., после того как в работе [1] было открыто формирование упорядоченной сверхструктуры в составе $Fe_3Al$. Детали этих процессов интересны с научной и важны с практической точек зрения, имея в виду многочисленные технологические применения этих сплавов. Сведения, имевшиеся к середине 1980-х гг., систематизированы в монографии [2], где, в частности, показано, что атомное упорядочение оказывает определяющее влияние на важнейшие физические и технологические характеристики сплавов – их термодинамические свойства, прочность, пластичность и т.д. Анализ процессов упорядочения затруднен влиянием большого числа разнообразных факторов на их протекание и на степень их завершенности, что обуславливает постоянное появление новых работ на эту тему. Сравнительно недавними примерами являются публикации [3–5], в которых изучалось влияние механической деформации и наличия примесных атомов на степень упорядочения, магнитные свойства и электронную структуру Fe–Al сплавов. Например, согласно *ab initio* вычислениям электронной структуры в работе [4], состав $Fe_3Al$ в равновесном состоянии должен находиться в фазе $D0_3$, т.е. быть полностью упорядоченным именно так, как было установлено в [1]. Большое внимание привлекает необычное поведение магнитных свойств этого состава, на которые сильное влияние оказывают локальные флуктуации числа атомов Al в ближайшем окружении атомов железа [6, 7].

Наиболее широко используемыми источниками сведений о структурных состояниях упорядочивающихся интерметаллидов являются просвечивающая электронная микроскопия и дифракция рентгеновских лучей. Оба метода позволяют уверенно идентифицировать присутствующие структурные фазы по положениям наблюдающихся дифракционных пиков, а электронная микроскопия еще и различать гомогенное выделение упорядоченной фазы от негомогенного. Серьезным недостатком этих методов является малая проникающая способность рентгеновских лучей и еще меньшая у электронов и, как следствие, невозможность анализа объемных эффектов. Не меньшей проблемой является практическая невозможность количественного анализа интенсивностей дифракционных пиков и слишком малый контраст в случае сплавов, состоящих из близких по атомному номеру элементов.

В случае Fe–Al сплавов дифракция нейтронов, начиная с работы [8], использовалась, в основном, для определения характеристик их магнитной струк-

1)e-mail: bobrikov@nf.jinr.ru

туры, в частности, магнитного форм-фактора и величины упорядоченного магнитного момента атомов железа, находящихся в разных структурных позициях упорядоченной $D0_3$ фазы. Однако в наших недавних работах по структурным фазовым переходам в $Fe_3Me$ (Me = Al, Ga, Ge) сплавах [9–11] было показано, что сочетание дифракции нейтронов высокого разрешения и дифракции в реальном времени позволяет получить важную дополнительную информацию о процессах упорядочения на атомном и микроструктурном уровнях. Наличие сильной связи между микроструктурой кристаллического материала и протекающими в нем структурными процессами в принципе хорошо известно, но количественных исследований на эту тему, выполненных современными ядерно-физическими методами, пока совсем мало.

В настоящей работе представлены нейтронные дифракционные данные, полученные на составе Fe–26.5Al, позволяющие по-новому интерпретировать происходящие в нем процессы упорядочения атомов. Из анализа дифрактограмм, измеренных в режиме *in-situ* при непрерывном сканировании по температуре, и дифракционных спектров, измеренных с высоким разрешением при некоторых фиксированных температурах, следует, что основной объем материала занят частично упорядоченной фазой B2, тогда как полностью упорядоченная фаза $D0_3$ организована в виде когерентно вставленных в матрицу B2 мезоскопических по размерам (на уровне сотен Å) кластеров.

**Эксперимент.** Образец Fe–Al был получен плавлением соответствующей смеси чистых Fe и Al (99.99 %) в индукционной печи в аргоновой атмосфере и последующей кристаллизацией в медной форме. Химический состав слитка, $Fe_{0.735}Al_{0.265}$, был установлен с помощью энергодисперсионной спектроскопии с точностью 0.2 %. Для нейтронного эксперимента из слитка был вырезан образец в форме параллелепипеда, размерами $4\times8\times50$ мм (далее обозначается как Fe-27Al).

Измерения дифракционных спектров выполнены на фурье-дифрактометре высокого разрешения (HRFD) [12], на импульсном реакторе ИБР-2 в ОИЯИ (Дубна). Важной особенностью HRFD является возможность переключения с режима очень высокого разрешения ($\Delta d/d \approx 0.0010$) на режим высокой светосилы, в котором дифракционная информация может накапливаться со средним разрешением ($\Delta d/d \approx 0.015$), но за очень короткие ($\sim$1 мин) интервалы, что необходимо для набора данных в реальном времени.

Вначале был проведен цикл нагрева (до 900 °C) и последующего охлаждения (до 20 °C) со скоростью около ±2 град/мин с исходным (после литья) образцом, в ходе которого каждую минуту измерялись спектры в режиме среднего разрешения. Эта процедура занимала около 15 ч и приводила к диффузионному отжигу образца, т.е. гомогенизации состава и приближению к равновесному состоянию.

Перед нагревом, при $T = 900$ °C и после охлаждения до комнатной температуры измерялись спектры высокого разрешения. Затем образец был закален, т.е. нагрет до 900 °C, выдержан при этой температуре в течение 1 ч и охлажден погружением в воду, после чего был измерен спектр высокого разрешения и повторен нагрев до 900 °C со скоростью около 2 град/мин.

Таким образом, дифракционные спектры высокого разрешения, по которым определялось микроструктурное состояние образца, были измерены для трех его состояний: после отливки и длительной (> 1 г.) выдержки (далее обозначается как “слабо неравновесное”), после нагрева и охлаждения с малой скоростью (далее – “близкое к равновесному”) и после закалки (далее – “сильно неравновесное”).

**Результаты.** В исходном состоянии образца нейтронные дифракционные спектры полностью индексируются в соответствии со структурой фазы $D0_3$. При нагреве и последующем охлаждении зафиксированы последовательности переходов: $D0_3 \rightarrow$ $\rightarrow$ B2 $\rightarrow$ A2 и обратно (рис. 1). Фаза $D0_3$, впервые обнаруженная в [1], представляет собой кубическую ячейку (пр. гр. $Fm\bar{3}m$) с удвоенным по отношению к неупорядоченной A2 фазе параметром элементарной ячейки. В составе $Fe_3Al$ возможно полное упорядочение атомов железа в позициях (4a) – (0, 0, 0) и (8c) – (1/4, 1/4, 1/4) и Al в позиции (4b) – (1/2, 1/2, 1/2). В кубической ячейке фазы B2 (пр. гр. $Pm\bar{3}m$) атомы находятся в позициях (1a) – (0, 0, 0) и (1b) – (1/2, 1/2, 1/2). Полное упорядочение в этой фазе возможно для состава $Fe_{0.5}Al_{0.5}$. Для состава $Fe_{1-\delta}Al_\delta$ ($\delta < 0.5$) при максимально возможном упорядочении (т.е. без учета термического разупорядочения) атомы Fe полностью заполняют позицию (1a), тогда как позиция (1b) заполняется атомами Fe или Al с вероятностями $(1 - 2\delta)$ и $2\delta$, соответственно. То есть для $\delta = 0.265$ вероятности нахождения Fe или Al в 1b равны 47 и 53 %. В фазе A2 ($Im3m$) упорядочение отсутствует, атомы Fe и Al с вероятностями 0.735 и 0.265 занимают позицию (2a) – (0, 0, 0), (1/2, 1/2, 1/2).

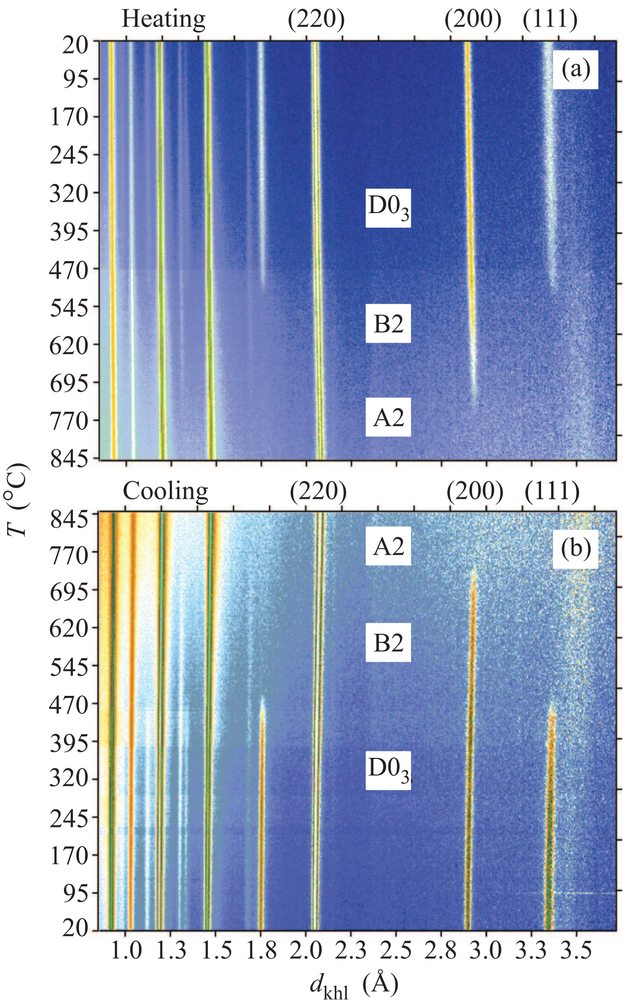


Рис. 1. (Цветной онлайн) 2D представление структурных переходов в Fe-27Al при нагревании (a) и охлаждении (b). Ось межплоскостных расстояний – слева направо, ось температуры (и времени) – сверху вниз. Исходное (до нагрева) и конечное (после охлаждения) состояния – фаза $D0_3$, характеризующаяся наличием пиков (111) и (200). В фазе B2 пик (111) отсутствует, пик (200) остается. В фазе A2 нет обоих этих пиков. Скорости нагрева и охлаждения составляли $\pm 2$ град/мин, время измерения одного спектра – 1 мин, т.е. каждая картинка содержит около 400 спектров

Фазовые переходы $D0_3 \rightarrow B2 \rightarrow A2$ фиксируются по исчезновению некоторых дифракционных пиков, которые можно разделить на три группы:

– интенсивные пики с четными индексами Миллера $(h, k, l)$ и суммой $(h+k+l)$, кратной 4, разрешенные во всех трех фазах;

– менее интенсивные пики с четными $(h, k, l)$ и нечетной величиной $(h+k+l)/2$, разрешенные в фазах $D0_3$ и B2;

– слабые (сверхструктурные) пики с нечетными $(h, k, l)$, разрешенные только в фазе $D0_3$.

Интенсивность сверхструктурных пиков пропорциональна $(b_{\mathrm{Fe}} - b_{\mathrm{Al}})^2$, где $b_{\mathrm{Fe}} = 0.945$ и $b_{\mathrm{Al}} = 0.345$ (в единицах $10^{-12}$ см) – когерентные длины рассеяния нейтронов ядрами железа и алюминия. Сравнительно большая разница между $b_{\mathrm{Fe}}$ и $b_{\mathrm{Al}}$ (высокий контраст) обуславливает достаточно большую интенсивность сверхструктурных пиков, позволяющую уверенно регистрировать их за 1 мин экспозиции.

Дифракционные спектры высокого разрешения для исходного (до нагрева) и конечного (после охлаждения) состояний показаны на рис. 2. Видно, что в целом они идентичны, но после нагрева–охлаждения выросла интенсивность сверхструктурных пиков, особенно пиков (111) и (311), что свидетельствует об увеличении степени порядка, либо

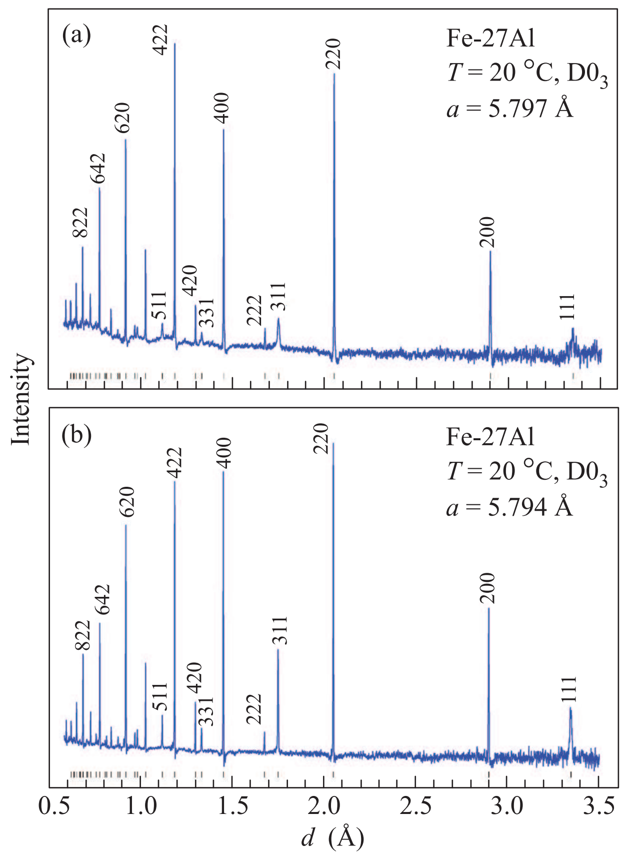


Рис. 2. (Цветной онлайн) Нейтронные дифракционные спектры состава Fe-27Al, находящегося в исходном (до нагрева) состоянии (a) и после нагрева-охлаждения (b). Все пики в обоих спектрах индицируются в фазе $D0_3$ ($Fm\bar{3}m$) с близкими параметрами кубической ячейки. Указаны индексы Миллера сильных регулярных пиков ($h+k+l = 4n$) и сверхструктурных пиков ($h$, $k$, $l$ нечетные), связанных с упорядочением атомов Fe и Al по позициям

об увеличении доли объема образца, занятой упорядоченной $D0_3$ фазой. Так, отношение интенсивностей сверхструктурного (311) и основного (220) пиков увеличилось в 1.5 раза, тогда как отношение интенсивностей пиков (200) и (220) осталось неизменным. Зависимости интенсивностей характерных пиков и величины атомного объема (объем элементарной ячейки, приходящийся на 1 атом) от температуры показаны на рис. 3. Очевидно, что при переходах эти величины изменяются непрерывным образом, что резко отличает этот состав от Fe-27Ga, в котором переход из $D0_3$ в A2 идет через фазы $L1_2$ и $D0_{19}$ с другой, чем в $D0_3$, топологией упорядочения [13]. Плавное уменьшение при нагреве интенсивностей сверхструктурных пиков, относящихся к фазам $D0_3$ и B2 (и столь же плавный их рост при охлаждении), свидетельствует о том, что переходы $D0_3 \rightarrow B2 \rightarrow A2$ и обратно являются типичными переходами порядок-беспорядок 2-го рода.

Анализ спектров высокого разрешения привел к неожиданным выводам относительно микроструктурных характеристик образца. Известно, что в ширины дифракционных пиков, помимо вклада от функции разрешения дифрактометра, дают вклад эффекты деформаций и конечного размера кристаллитов (см., например, [14]). Первый из них связан с дисперсией межплоскостных расстояний в кристаллитах из-за наличия в них точечных или объемных дефектов. Второй эффект обусловлен ограничением на размер областей когерентного рассеяния (ОКР). Согласно анализу Вильямсона–Холла, эти два эффекта по разному влияют на функциональную зависимость ширины пиков от межплоскостного расстояния. В частности, для HRFD зависимости $W^2$ от $d^2$, где W – полная ширина пиков на половине высоты, $d$ – межплоскостное расстояние, должны быть линейными для поликристаллов с большими (> 3000 Å) ОКР или квадратичными в противном случае. Соответственно, измеряя ширины пиков в достаточно большой области изменений $d_{\mathrm{hkl}}$ и анализируя их функциональную зависимость от $d^2$, можно определить как величину микродеформаций, так и размеры ОКР.

На рис. 4 показаны зависимости $W^2$ от $d^2$, измеренные в исходном состоянии сплава и после его нагрева–охлаждения. Видно, что на (почти) линейную зависимость укладываются ширины пиков с четной суммой индексов Миллера, т.е. те, которые разрешены для структурной фазы B2. Наоборот, ширины сверхструктурных пиков, разрешенных только в фазе $D0_3$, резко отличаются по величине и для них зависимости $W^2$ от $d^2$ параболические. Еще одним важным фактом является то, что после нагрева–охлаждения ширины основных пиков уменьшились,

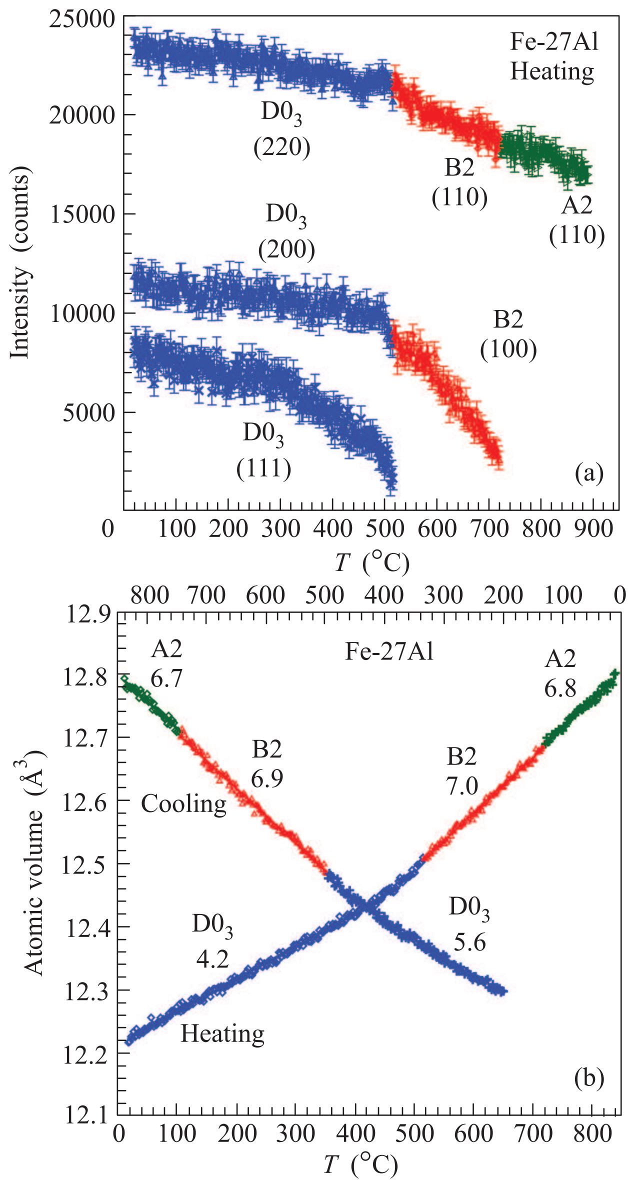


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Интенсивности отмеченных в тексте трех типов дифракционных пиков как функция температуры при нагревании. При охлаждении изменения интенсивностей этих пиков происходят аналогичным образом в обратном порядке. (b) – Атомный объем структурных фаз как функция температуры при нагревании ($D0_3 \rightarrow B2 \rightarrow A2$, нижняя шкала) и охлаждении ($A2 \rightarrow B2 \rightarrow D0_3$, верхняя шкала). Рядом с обозначениями фаз указаны значения объемного КТР (в единицах $10^{-5}$ 1/град). Для интенсивностей показаны статистические ошибки точек. Для атомного объема – ошибки не превышают размера символов. Скорости нагрева и охлаждения составляли ± 2 град/мин, время измерения каждой точки – 1 мин

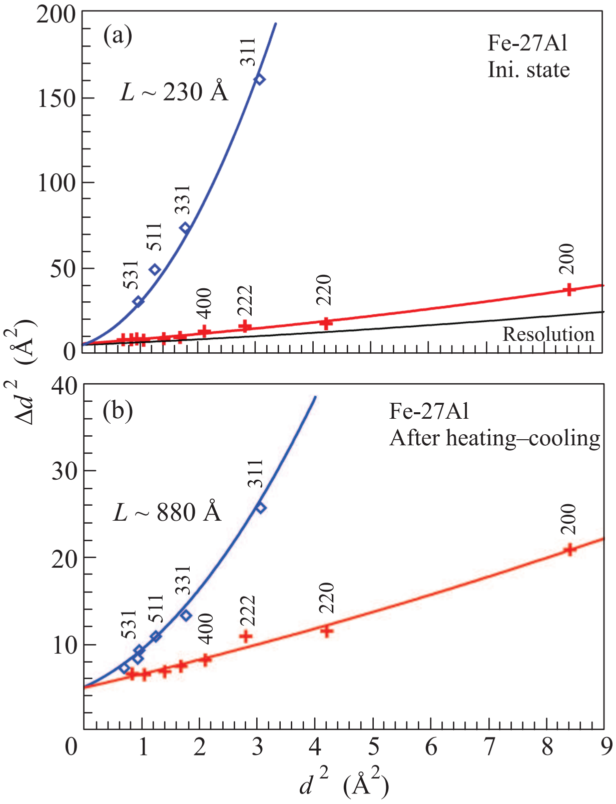


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости $W^2$ от $d^2$ для сплава Fe-27Al в исходном (до нагрева) состоянии (a) и после цикла нагрева – охлаждения (b). Ширины пиков, разрешенных в B2 фазе (красные кресты) укладываются на линейную зависимость, тогда как ширины пиков, разрешенных в только $D0_3$ фазе (синие ромбы) описываются квадратичной зависимостью. Параметры квадратичной зависимости соответствуют среднему размеру ОКР $L \sim 230$ Å (в исходном состоянии) и $L \sim 880$ Å (после нагрева–охлаждения). Ширины пиков фазы B2 после нагрева–охлаждения практически совпадают с вкладом от функции разрешения HRFD (нижняя линия на рис. a). Значения $\Delta d^2$ умножены на $10^6$

но незначительно (на $\approx 30$ %), тогда как сверхструктурные пики стали уже почти в 2.5 раза.

Эти факты можно объяснить, предполагая, что в бо́льшей части объема кристаллитов атомы Fe и Al упорядочены (частично) в фазе B2, а полностью упорядоченная фаза $D0_3$ представляет собой кластеры, когерентно вставленные в матрицу B2. Характерные размеры этих кластеров, $L$, напрямую оцениваются из коэффициента при $d^4$ в зависимости $W^2(d^2)$, а именно, в слабо неравновесном состоянии $L = 230 \pm 20$ Å, в состоянии, близком к равновесному $L = 880 \pm 22$ Å. Некоторое уменьшение ширин основных пиков естественным образом объясняется уменьшением величины микродеформаций в кристаллитах.

Для определения структурных характеристик образца и, в частности, степени упорядочения Fe и Al по позициям, наиболее адекватным является подход с использованием метода Ритвельда для анализа дифракционных спектров. Однако в случае литых сплавов этому препятствует наличие выраженной текстуры. Поэтому факторы заполнения структурных позиций определялись из отношений интенсивностей порядков отражения, поскольку они не искажаются текстурой.

Для фазы B2 наиболее надежно это можно сделать по интенсивностям пиков (100) и (200) (пики (200) и (400) в ячейке фазы $D0_3$), для которых $I_{100}/I_{200} = (d_{100}/d_{200})^4 \cdot (F_{100}/F_{200})^2$, где отношение межплоскостных расстояний учитывает факторы Лоренца, $F_{\rm hkl}$ – структурные факторы. При частичном упорядочении атомов вероятность заполнения позиций, например, (1a) есть $(1 - \delta + x)$ и $(\delta - x)$ для Fe и Al, соответственно, где $\delta = 0.265$ – содержание Al в сплаве, $x$ – доля атомов в позиции, дополнительная к стехиометрической, причем $0 \le x \le \delta$. С учетом этого обстоятельства расчет структурных факторов для пиков (100) и (200) дает: $F_{100} = 2x(b_{\rm Fe} - b_{\rm Al})$, $F_{200} = 2b_{\rm Fe} - 2\delta(b_{\rm Fe} - b_{\rm Al})$, где $b_{\rm Fe} = 0.945$ и $b_{\rm Al} = 0.345$ – когерентные длины рассеяния нейтронов ядрами железа и алюминия (в единицах $10^{-12}$ см). В этих формулах не учтены факторы Дебая–Валлера, т.к. их отношение для этих двух пиков очень близко к единице (около 0.98). Рассчитанные зависимости факторов заполнения позиций ($n = \delta + x$) от температуры при нагреве и охлаждении состава Fe-27Al показаны на рис. 5. Из расчета следует, что в исходном состоянии и вплоть до $T \approx 500$ °C атомы Fe и Al упорядочены в максимальной степени, а именно, в узле (1a) находится 100 % Fe, в узле (1b) находится 47 % Fe и 53 % Al. Затем степень упорядочения постепенно уменьшается и при $T \approx 720$ °C оно скачком исчезает, т.е. $x = 0$, $n = \delta = 0.265$). В ходе охлаждения эти процессы повторяются в обратном порядке, с точностью до температур появления упорядочения при $T \approx 740$ °C и достижения его максимальной степени при $T \approx 480$ °C. Из рис. 5 видно, что среднее значение $n$(Al) при низких температурах слегка превышает его максимально возможное для фазы B2 значение, 0.54 вместо 0.53. Наиболее вероятно, что это связано с небольшой, около 4 %, ошибкой в нормировке интенсивностей пиков (100) и (200) на эффективный спектр нейтронов на HRFD. Кроме того, интенсивность пика (100) может быть несколько завышена из-за вклада магнитного рассеяния.

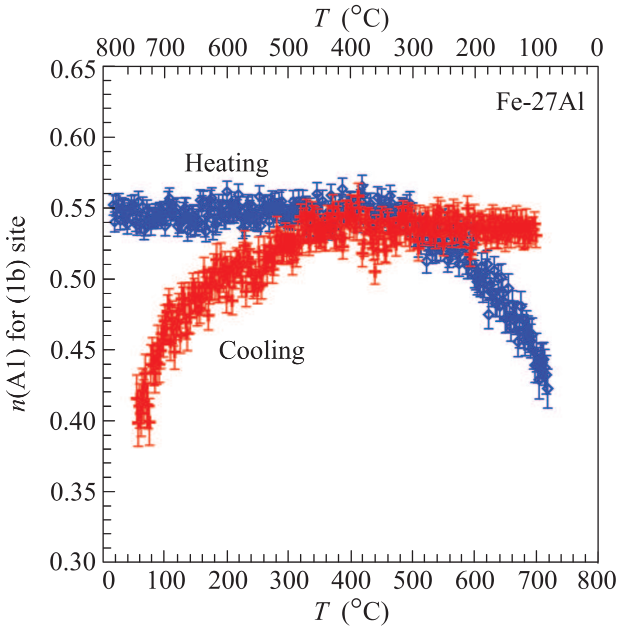


Рис. 5. (Цветной онлайн) Фактор заполнения позиции (1b) атомами Al при нагреве образца из исходного состояния (нижняя шкала, синие ромбы) и последующего охлаждения (верхняя шкала, красные кресты). Для состава Fe-27Al, находящегося в фазе B2, максимально возможное расчетное значение этого фактора $n_{\max} = 0.53$. Показаны статистические ошибки точек

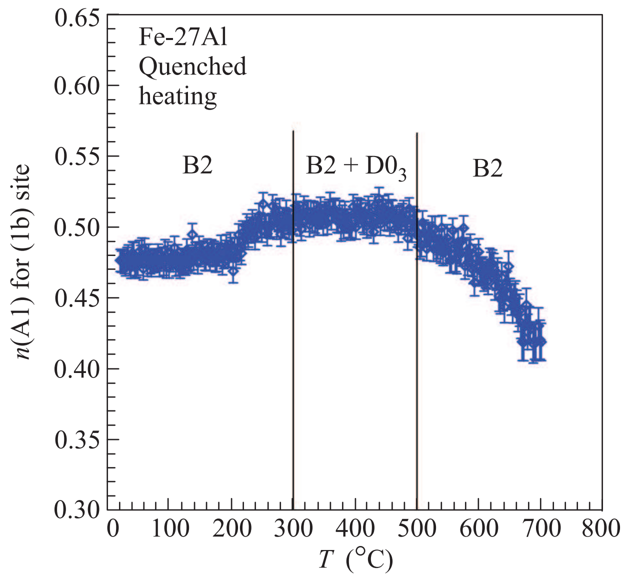


Рис. 6. (Цветной онлайн) Фактор заполнения позиции (1b) атомами Al при нагреве образца после его закалки. Для состава Fe-27Al, находящегося в фазе B2, максимально возможное значение этого фактора $n_{\max} = 0.53$. Вертикальными линиями выделены области существования структурных фаз. Пунктирной линией отмечена температура исчезновения упорядочения атомов, $T \approx 700\,^\circ$C. Показаны статистические ошибки точек

Для проверки выявленных закономерностей аналогичным образом были обработаны дифракционные спектры, измеренные на образце после его закалки, т.е. находящегося в сильно неравновесном состоянии. Из дифракционных спектров высокого разрешения следует, что в этом случае при комнатной температуре он находится в фазе B2. После нагрева образца до 300 °C в нем появились области с фазой D0$_3$, которые исчезают при $T \approx 500\,^\circ$C. Параметры элементарной ячейки практически одинаковы в состояниях после разливки и после закалки и одинаково изменяются с ростом температуры. Результат расчета факторов заполнения позиций в этом состоянии образца по изложенной выше методике показан на рис. 6. Видно, что в целом, наблюдается аналогичная показанной на рис. 5 зависимость $n$(Al) от температуры. Отличиями являются заметно меньшая степень упорядочения при температурах до 200 °C и его исчезновение при несколько меньшей температуре (700 °C вместо 720 °C).

**Обсуждение и выводы.** Из фазовой диаграммы равновесных состояний состава Fe-27Al, приведенной как в оригинальных работах [15], так и в справочнике [16], можно видеть, что в интервале от комнатной температуры до 550 °C он находится в фазе D0$_3$, затем в B2 и выше 800 °C в A2. Из приведенных результатов следует, что если руководствоваться только данными о наличии в дифракционных спектрах тех или иных наборов пиков, то можно сделать вывод о том, то в образце, находящемся в слабо неравновесном и близком к равновесному состояниях, происходят такие же D0$_3$ $\to$ B2 $\to$ A2 структурные превращения, но с несколько пониженными температурами переходов.

Более глубокий анализ имеющихся данных, показал, однако, что в этих состояниях большая часть объема образца занята частично упорядоченной фазой B2, а полностью упорядоченная фаза D0$_3$ занимает лишь небольшие по размерам (на уровне сотен Å) области. Отличие между ними состоит только в характерном размере кластеров D0$_3$ фазы, возросшем после медленных нагрева и охлаждения почти в 4 раза. Этот результат следует из существенно разной функциональной зависимости ширин основных и сверхструктурных дифракционных пиков от межплоскостного расстояния (рис. 4). Действительно, если в ширинах основных пиков эффект размера практически отсутствует ($L \geq 3000$ Å, что близко к пределу чувствительности HRFD), то главным вкладом в ширины сверхструктурных пиков является именно эффект малого размера областей когерентного рассеяния.

Дополнительным аргументом в пользу такой интерпретации дифракционных данных можно считать отсутствие каких-либо заметных скачков в зависимостях от температуры интенсивностей и положений дифракционных пиков (из которых рассчитывается атомный объем) при переходах $D0_3 \leftrightarrow B2$ (рис. 3, 6). Прямой расчет параметров элементарных ячеек фазы B2 по положениям основных дифракционных пиков и фазы $D0_3$ по положениям сверхструктурных пиков показал их соответствие (рис. 7) с очень высо-

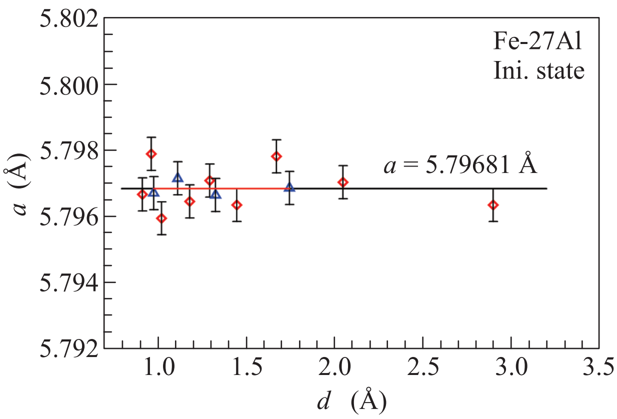


Рис. 7. (Цветной онлайн) Параметр элементарной ячейки, определенный из положений отдельных дифракционных пиков для структурных фаз B2 (удвоенное значение) и $D0_3$. Среднее значение параметра для основных пиков (красные ромбы) и сверхструктурных пиков (синие треугольники) одинаково с относительной точностью $\sim 10^{-6}$

кой точностью (относительное различие параметров $\Delta a/a \approx 10^{-6}$), т.е. фаза $D0_3$ может присутствовать в матрице фазы B2 абсолютно когерентно.

Из-за сильной текстурированности образца оценить относительное количество фазы $D0_3$ в его объеме можно только приближенно из отношений интенсивностей основных и сверхструктурных пиков. Из проведенной оценки следует, что объем, занятый кластерами $D0_3$ в исходном состоянии образца, составляет не менее 15 % и увеличивается в $\sim 1.5$ раза после нагрева-охлаждения. Соответственно, если бы в кристаллитах была некогерентная смесь фаз, то в дифракционных спектрах высокого разрешения основные пики должны были бы представлять собой сумму узких пиков от фазы B2 и широких пиков от фазы $D0_3$, чего на самом деле не наблюдается.

Основным результатом выполненных экспериментов является вывод о том, что как слабо неравновесное, так и близкое к равновесному состояния интерметаллида Fe-27Al структурно представляют собой частично упорядоченную фазу B2, в которую когерентно встроены мезоскопические по размерам кластеры полностью упорядоченной фазы $D0_3$. Этот вывод предполагает необходимость дополнительного анализа равновесной фазовой диаграммы системы Fe–Al. Еще одним важным и имеющим принципиальное значение результатом следует считать количественную оценку степени упорядочения атомов по структурным позициям в элементарной ячейке и определение ее температурной зависимости вплоть до перехода в неупорядоченное состояние при $T > 700\,^\circ$C. А именно, с хорошей точностью установлено, что упорядочение Fe и Al в фазе B2 может достигать максимально возможных значений, в том числе в сильно неравновесном (закаленном) состоянии, а их постепенное температурное разупорядочение идет по механизму перехода второго рода. Представленные результаты удалось получить только благодаря сочетанию дифракции нейтронов очень высокого разрешения ($\Delta d/d \approx 0.0010$) и термо-дифрактометрическому сканированию в реальном времени с измерением дифрактограмм каждую минуту.

Авторы благодарны Р.Н. Васину за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант # 14-12-00896. Нейтронные эксперименты выполнены на нейтронном источнике ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна).

1. A. J. Bradley and A. H. Jay, Proc. Roy. Soc. (London) A **136**, 210 (1932).
2. А. М. Глезер, Б. В. Молотилов, *Упорядочение и деформация сплавов железа*, Металлургия, М. (1984).
3. D. Martin Rodriguez, E. Apinaniz, J. S. Garitaonandia, F. Plazaola, D. S. Schmool, and G. Cuello, J. of Magnetism and Magnetic Materials **272–276**, 1510 (2004).
4. A. Go and L. Dobrzynski, Acta Physica Polonica A **121**, 1124 (2012).
5. O. A. Lambri, J. I. Perez-Landazabal, V. Recarte, G. J. Cuello, and I. S. Golovin, J. of Alloys and Compounds **537**, 117 (2012).
6. J. W. Cable, L. David, and R. Parra, Phys. Rev. B **16**, 1132 (1997).
7. Е. П. Елсуков, Е. В. Воронина, А. В. Королев, А. Е. Елсукова, С. Л. Годовиков, ФММ **104**, 38 (2007).
8. S. J. Pickart and R. Nathans, Phys. Rev. **123**, 1163 (1961).
9. I. S. Golovin, A. M. Balagurov, V. V. Palacheva, I. A. Bobrikov, and V. B. Zlokazov, Materials and Design **98**, 113 (2016).

10. I. S. Golovin, A. M. Balagurov, I. A. Bobrikov, and J. Cifre, J. of Alloys and Compounds **688**, 310 (2016).
11. A. M. Balagurov, I. A. Bobrikov, I. S. Golovin, V. V. Cheverikin, and S. A. Golovin, Materials Lett. **181**, 67 (2016).
12. A. M. Balagurov, Neutron News **16**(3), 8 (2005).
13. I. S. Golovin, A. M. Balagurov, I. A. Bobrikov, V. V. Palacheva, and J. Cifre, J. of Alloys and Compounds **675**, 393 (2016).
14. E. J. Mittemeijer and U. Welzel, Z. Kristallogr. **223**, 552 (2008).
15. P. R. Swann, W. R. Duff, and R. M. Fischer, Metall. Transact. **3**, 409 (1972).
16. O. Kubaschewski, *Iron-Binary phase diagrams*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg (1982), p. 5.