

УДК 539.2:530.145

Д.А.БАДАЛЯН, А.А.МУРАДЯН

УЧЕТ КОРРЕЛЯЦИИ АТОМОВ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ СО
 СЛОЖНЫМИ РЕШЕТКАМИ И В СВЕРХСТРУКТУРАХ С
 НЕСКОЛЬКИМИ ПАРАМЕТРАМИ ДАЛЬНЕГО ПОРЯДКА

Построена микроскопическая теория эффектов ближнего порядка в металлических упорядочивающихся бинарных сплавах с произвольной структурой в приближении кольцевых диаграмм. Получена конфигурационная свободная энергия сплава, которая применима для систем с произвольным составом и радиусом межатомного взаимодействия. В качестве конкретного приложения теории рассмотрены сверхструктуры типа Fe_3Al и сплава АВ в гексагональной решетке.

Эффекты ближнего порядка в металлических твердых растворах влияют на многие важные свойства кристаллов. Параметры корреляции или их Фурье-образы могут быть использованы и для изучения характера и природы межатомных взаимодействий в чистых металлах и сплавах [1].

В настоящее время имеется несколько общепринятых методов учета корреляции атомов в бинарных сплавах [2,3]. Однако возможности этих методов достаточно ограничены. В [4] эти ограничения устранены обобщением метода Кирквуда [5] на случай взаимодействия атомов в произвольном числе координационных сфер. Соответствующая теория является вариантом термодинамической теории возмущений, основанной на разложении свободной энергии сплава в ряд по степеням энергии взаимодействия. Для вычисления различных членов этого разложения в [6] сформулированы правила диаграммой техники. Выделен класс так называемых кольцевых диаграмм, соответствующих расходящимся в точке фазового перехода II рода флуктуациям состава или дальнего порядка сплава. В качестве примера рассмотрены твердые растворы типа АВ с простой слоистой структурой.

В настоящей статье методика расчета [6] распространяется на более сложные и практически важные случаи систем с несколькими параметрами дальнего порядка и сверхструктур, неупорядоченная фаза которых является решеткой с базисом.

I. Будем исходить из выражения для свободной энергии, описывающей вклад эффектов ближнего порядка в приближении кольцевых диаграмм [6]

$$\Delta F^k = -\chi T \sum_{n=1}^{\infty} (-\beta)^n M_n^k / n!, \quad (1)$$

где $\beta = 1/\chi T$, χ — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура,

$$M_n^k = \frac{n!}{2^n} \sum_{1,2,\dots,n} \tilde{V}_{12} \tilde{V}_{23} \dots \tilde{V}_{n1} \cdot f_1 \cdot f_2 \dots f_n, \quad (2)$$

$\tilde{V}_{ij} \equiv V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ — энергии смещения для узлов кристаллической решетки \vec{r}_i и \vec{r}_j ; $f_i = n(\vec{r}_i)(1 - n(\vec{r}_i))$, где $n(\vec{r}_i)$ — вероятность обнаружения атома сорта A в узле \vec{r}_i .

Для упорядочивающихся сплавов, неупорядоченная фаза которых описывается одной из 14 решеток Бравэ ($\tilde{V}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \tilde{V}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$, \vec{R}_i — радиус-вектор узла решетки Бравэ), из (1) и (2) получена формула [6]

$$\Delta F^k = \frac{1}{2} \chi T \sum_{p=1}^N \ln(1 + \beta U_p), \quad (3)$$

где N — полное число узлов кристалла, U_p — собственное значение матрицы \hat{U} ранга N , элементы которой определяются из равенств

$$U_{\vec{k}\vec{k}'} = N^{-1} [V(\vec{k})V(\vec{k}')]^{1/2} \sum_{\vec{R}} f(\vec{R}) \exp i\vec{R}(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (4)$$

$V(\vec{k}) = \sum_{\vec{R} \neq 0} \tilde{V}(\vec{R}) \exp(-i\vec{k}\vec{R})$, \vec{k} — волновой вектор в 1 зоне Бриллюэна неупорядоченного кристалла.

Для построения матрицы \hat{U} используем представление вероятностей $n(\vec{R})$ в виде суперпозиции плоских статических концентрационных волн [7]

$$n(\vec{R}) = c + \sum_{s, j_s} \eta_s \gamma(\vec{k}_{j_s}) \exp i\vec{k}_{j_s} \vec{R}, \quad (5)$$

где c — концентрация атомов сорта A , η_s — параметры дальнего порядка, коэффициенты $\gamma(\vec{k}_{j_s})$ выбираются таким образом, чтобы функция $n(\vec{R})$ в любой степени имела форму, аналогичную (5), за исключением c и η_s .

Суммирование по \vec{k} разбито на сумму по индексу j_s , характеризующему волновые векторы, входящие в звезду волновых векторов s и по различным звездам.* Подставляя (5) в (4), получим

$$U_{\vec{k}\vec{k}'} = cV(\vec{k})\delta_{\vec{k}\vec{k}'} + [V(\vec{k})V(\vec{k}')]^{1/2} \sum_{s, j_s} \tilde{\eta}_s \gamma(\vec{k}_{j_s}) \delta_{\vec{k} + \vec{k}_{j_s}, \vec{k}'}, \quad (6)$$

где c и η_s — функции, зависящие от c и η_s , конкретный вид которых определяется структурой упорядоченного сплава; $\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$ — символ Кронекера.

Учитывая при этом, что нумерация векторов \vec{k}, \vec{k}' в 1 зоне произвольна, матрицу \hat{U} можно представить в блочно-диагональном виде с $N / (\sum_{s, j_s} 1 + 1)$

штук блочными элементами

$$\hat{M}_\alpha(p, p') = \left\| \Phi_{pp'} [V(\vec{k}^\alpha + \vec{k}_p) V(\vec{k}^\alpha + \vec{k}_{p'})]^{1/2} \right\|, \quad (7)$$

* Звездой вектора \vec{k}_0 называется совокупность векторов $\{\vec{k}_0\}$, полученная из \vec{k}_0 применением к нему всех преобразований поворота и отражения неупорядоченного кристалла.

где $\alpha = 1, P+2, 2P+3, \dots, N - (P+1); \vec{k}_0 \equiv 0$,
 $\vec{k}_{p \neq 0} \equiv \vec{k}_{j_s}, p, p' = 0, 1, 2, \dots, P (P = \sum_{s,j_s} 1$ — полное число волновых векторов \vec{k}_{j_s}
характеризующих данную сверхструктуру);

$$\Phi_{pp'} = \tilde{c} \delta_{pp'} + \tilde{\eta}_m \gamma(\vec{k}_{j_m}) (1 - \delta_{pp'}),$$

где \vec{k}_{j_m} — сверхструктурный вектор, удовлетворяющий условию $\vec{k}_{p'} - \vec{k}_p = \vec{k}_{j_m}$. Совокупность векторов $\{\vec{k}^\alpha\}, \{\vec{k}^\alpha + \vec{k}_1\}, \dots, \{\vec{k}^\alpha + \vec{k}_p\}$ представляет собой множество N разрешенных волновых векторов в 1 зоне Бриллюэна неупорядоченной решетки.

Представление \hat{U} в квазидиагональном виде существенно упрощает поставленную задачу: проблема нахождения N собственных чисел матрицы \hat{U} фактически сводится к определению нескольких собственных значений одной субматрицы \hat{M}_α . При этом суммирование по индексу p в (3) разбивается на суммы по волновым векторам \vec{k}^α и по индексу l , нумерующему $P+1$ собственных значений $a_l(\vec{k}^\alpha)$ матрицы \hat{M}_α . Эту последнюю сумму можно представить в виде логарифма от произведения множителей типа $1 + \beta a_l(\vec{k}^\alpha)$. Используя стандартные формулы (теорему Виетта), связывающие корни $a_l(\vec{k}^\alpha)$ секулярного уравнения $|M_\alpha(p, p') - a(\vec{k}^\alpha) \delta_{pp'}| = 0$ с коэффициентами характеристического полинома оператора \hat{M}_α , получим

$$\Delta F^k = \frac{\chi T}{2(P+1)} \sum_{\vec{k}} \ln \left[1 + \sum_{i,l} \beta^l A_i^{(l)}(\vec{k}) \right], \quad (8)$$

где $A_i^{(l)}(\vec{k})$ — i -й главный минор l -го порядка определителя $|M(p, p')|$ и суммирование (по i) распространяется на все главные миноры этого порядка; суммирование по \vec{k} производится по всем волновым векторам в 1 зоне Бриллюэна*.

Равенство (8) носит совершенно общий характер и справедливо к твердым растворам, имеющим в неупорядоченной фазе решетку Браве. Чтобы проиллюстрировать применение развитого метода для систем, характеризующихся несколькими параметрами дальнего порядка, рассмотрим сверхструктуру типа $Fe_3Al(Fe_3Si, Fe_3Co)$ в объемноцентрированном кубическом растворе. В последнем случае имеем распределение [7]

$$n_{Fe}(\vec{R}) = C + \frac{\eta_1}{4} \exp i \vec{k}_{01} \vec{R} + \frac{\eta_2}{4i} (\exp i \vec{k}_{02} \vec{R} - \exp(-i \vec{k}_{02} \vec{R})), \quad (9)$$

где $\vec{k}_{01} = 2\pi(\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^* + \vec{a}_3^*)$, $\vec{k}_{02} = \vec{k}_{01}/2$, \vec{a}_i^* — базисные векторы ГЦК обратной решетки в кубических направлениях. В данном случае

$$p, p' = 0, 1, 2, 3; \vec{k}_1 = \vec{k}_{01}, \vec{k}_2 = \vec{k}_{02}, \vec{k}_3 = -\vec{k}_{02}, \tilde{c} = c(1-c) - \eta_1^2/16 - \eta_2^2/8,$$

* При переходе к суммированию по полной зоне Бриллюэна каждое слагаемое в (8) повторяется $(P+1)$ раз.

$$\tilde{\eta}_1 = \eta_1(1-2c) + \eta_2^2/2 \text{ и } \tilde{\eta}_2 = \eta_2(1-2c) + \eta_1\eta_2/2;$$

$$\begin{aligned} \Phi_{pp} = \tilde{c}, \Phi_{01} = \Phi_{10} = \Phi_{23} = \Phi_{32} = \tilde{\eta}_1/4, \\ \Phi_{02} = \Phi_{13} = \Phi_{21} = \Phi_{30} = -\Phi_{20} = -\Phi_{31} = -\Phi_{12} = -\Phi_{03} = \eta_2/4i. \end{aligned} \quad (10)$$

Используя (7), (10), построим матрицу \hat{M} . Нахождение главных миноров определителя $|M(\rho, \rho')|$ приводит к следующему выражению для ΔF^k :

$$\begin{aligned} \Delta F^k = \frac{\chi T}{8} \sum_{\vec{k}} \ln \left\{ 1 + \beta \tilde{c} \sum_{\rho=0}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) + \right. \\ \left. + \beta^2 \sum_{\substack{\rho, \rho'=0 \\ (\rho < \rho')}}^3 g_{\rho\rho'} V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) V(\vec{k} + \vec{k}_{\rho'}) + \right. \\ \left. + \beta^3 g_1 \sum_{\substack{\rho, \rho', \rho''=0 \\ (\rho < \rho' < \rho'')}}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) V(\vec{k} + \vec{k}_{\rho'}) V(\vec{k} + \vec{k}_{\rho''}) + \right. \\ \left. + \beta^4 g_2 \prod_{\rho=0}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) \right\} \equiv \frac{\chi T}{8} \sum_{\vec{k}} \ln X(\vec{k}), \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} g_{01} = g_{23} = \tilde{c}^2 - \tilde{\eta}_1^2/1, \quad g_{02} = g_{03} = g_{12} = g_{13} = \hat{c}^2 - \hat{\eta}_2^2/16; \\ g_1 = \tilde{c}g_{01} - \tilde{\eta}_2^2(\hat{c} + \frac{\tilde{\eta}_1}{4})/8, \quad g_2 = g_{01} - \tilde{\eta}_2^2(\tilde{c} + \frac{\tilde{\eta}_1}{4})^2/4. \end{aligned}$$

Фурье-компоненты параметров корреляции $\varepsilon(\vec{k})$ [2], характеризующие ближний порядок в сплаве, определяются как производные $\varepsilon(\vec{k}) = \partial \Delta F / \partial (\frac{1}{2} V(\vec{k}))$. Из выражения (11) следует, что

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{k}) = X^{-1}(\vec{k}) \left\{ c + \beta \sum_{\rho=1}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) \cdot g_{0\rho} + \right. \\ \left. + \beta^2 g_1 \sum_{\substack{\rho, \rho'=1 \\ (\rho < \rho')}}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) V(\vec{k} + \vec{k}_{\rho'}) + \right. \\ \left. + \beta^3 g_2 \prod_{\rho=1}^3 V(\vec{k} + \vec{k}_\rho) \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

При переходе в неупорядоченное состояние ($\eta_1 = \eta_2 = 0$) уравнение (12) дает предельный переход в известную формулу Кривоглаза [8].

2. Рассмотрим теперь твердые растворы, неупорядоченная фаза которых описывается решеткой с базисом. В этом случае положение каждого узла \vec{r} может быть задано двумя векторами (\vec{R}, \vec{h}_q) , где \vec{R} определяет положение центра элементарной ячейки, в которой находится данный узел, \vec{h}_q — положение данного узла относительно центра ячейки: $\vec{r} = \vec{R} + \vec{h}_q, q = 1, 2, \dots, v$ (v — число узлов в элементарной ячейке). Вероятности $n(\vec{r})$, а также парные потенциалы взаимодействия атомов, находя-

щихся в узлах \vec{r} и \vec{r}' , могут быть представлены в виде $n(\vec{r}) = n(\vec{R} + \vec{h}_q) = n_q(\vec{R})$; $\tilde{V}(\vec{r}, \vec{r}') = \tilde{V}_{qq'}(\vec{R} - \vec{R}')$. Используя в (2) эти представления и выполняя преобразование Фурье, получим

$$M_n^k = \frac{n!}{2n} \sum_{\{k_i\}} \sum_{\{q_i\}} V_{q_1 q_2}(\vec{k}_1) V_{q_2 q_3}(\vec{k}_2) \dots V_{q_n q_1}(\vec{k}_n) \times \\ \times f_{q_1}(\vec{k}_n - \vec{k}_1) f_{q_2}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \dots f_{q_n}(\vec{k}_n - \vec{k}_{n-1}), \quad (13)$$

где $V_{qq'}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R} \neq 0} \tilde{V}_{qq'}(\vec{R}) \exp(-i\vec{k}\vec{R})$, $f_q(\vec{k}) = N^{-1} \sum_{\vec{R}} n_q(\vec{R}) (1 - n_q(\vec{R})) \exp i\vec{k}\vec{R}$, суммирование по каждому вектору \vec{k}_i в (13) проводится по 1 зоне Бриллюэна.

Введем собственные векторы $\varphi_\alpha(q, \vec{k})$ и собственные числа $\lambda_\alpha(\vec{k})$ оператора $\tilde{V}(\vec{k})$ (α — номер собственного значения, $\alpha = 1, 2, \dots, v$)

$$\sum_{q'} \tilde{V}_{qq'}(\vec{k}) \varphi_\alpha(q', \vec{k}) = \lambda_\alpha(\vec{k}) \varphi_\alpha(q, \vec{k}). \quad (14)$$

Выразим матричные элементы $V_{qq'}(\vec{k})$ через билинейное разложение

$$V_{qq'}(\vec{k}) = \sum_{\alpha} \lambda_\alpha(\vec{k}) \varphi_\alpha^*(q, \vec{k}) \varphi_\alpha(q', \vec{k}). \quad (15)$$

Используя (15), после некоторых преобразований в (13) получим

$$M_n^k = \frac{n!}{2n} s_p \hat{G}^n, \quad (16)$$

где \hat{G} — некоторая матрица (ранга vN) с элементами

$$G_{LL'} = \sum_q [\lambda_\alpha(\vec{k}) \lambda_{\alpha'}(\vec{k}')]^{1/2} \varphi_\alpha^*(q, \vec{k}) \varphi_{\alpha'}(q, \vec{k}') f_q(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (17)$$

Здесь индекс L для краткости заменяет пару переменных (α, \vec{k}) , $L, L' = 1, 2, \dots, vN$. Учитывая коммутативность операторов \hat{G} и \hat{G}^n , после подстановки (16) в (1) получим

$$\Delta F^k = \frac{1}{2} \chi T \sum_{L=1}^{vN} \ln(1 + \beta G_L), \quad (18)$$

где G_L — собственное значение матрицы G , причем $-1 < \beta G_L \leq 1$.

Для иллюстрации применения полученных формул рассмотрим, прежде всего, случай неупорядоченного сплава. Принимая во внимание, что в неупорядоченном состоянии $n_q(\vec{R}) = c$, а также соотношение ортогональности для собственных векторов

$$\sum_{q'} \varphi_\alpha^*(g\vec{k}) \varphi_{\alpha'}(q, \vec{k}) = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (19)$$

получим

$$G_{LL'} = c(1-c) \lambda_\alpha(\vec{k}) \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (20)$$

Корреляционная поправка к свободной энергии определяется равенством

$$\Delta F_{\text{несуп.}}^k = \frac{1}{2} \chi T \sum_{\vec{k}, \alpha} \ln(1 + \beta c(1-c) \lambda_\alpha(\vec{k})). \quad (21)$$

Фурье-компоненты параметров корреляции $\epsilon_{qq'}(\vec{k})$ определяются варьированием свободной энергии (21) по потенциалам $V_{qq'}(\vec{k})$.

В упорядоченной фазе функции $n_q(\vec{R})$ можно представить в виде разложения [7]

$$n_q(\vec{R}) = c + \sum_{\vec{k}, \sigma} Q_\sigma(\vec{k}) \varphi_\sigma(q, \vec{k}) \exp i \vec{k} \vec{R}, \quad (22)$$

где $Q_\sigma(\vec{k})$ — амплитуда «блоховской» волны $\varphi_\sigma(q, \vec{k}) \exp i \vec{k} \vec{R}$, $\varphi_\sigma(q, \vec{k})$ — собственная функция уравнения (14), $\sigma = 1, 2, \dots, v$. Суммирование по \vec{k} в (22), как и в случае решеток Бравэ, можно разбить на суммы по волновым векторам, входящим в звезду волновых векторов \vec{k}_s и по различным звездам.

В качестве примера упорядочивающегося сплава со сложной решеткой рассмотрим гексагональную компактную решетку со сверхструктурным вектором $\vec{k}_s = (0, 0, 0)$ (0 — вектор); $q = 1, 2$. Распределение атомов сорта A по узлам этой решетки описывается функцией

$$n_q(\vec{R}) = c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Матрице $\|V_{qq'}(\vec{k})\|$ отвечают следующие собственные значения $\lambda_\alpha(\vec{k})$ и соответствующие им векторы $\varphi_\alpha(q, \vec{k})$:

$$\lambda_1(\vec{k}) = V_{11}(\vec{k}) + V_{12}(\vec{k}), \quad \lambda_2(\vec{k}) = V_{11}(\vec{k}) - V_{12}(\vec{k}), \quad (24)$$

$$\varphi_1(q, \vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2(q, \vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Подставляя (23), (24) в (17), получим матрицу (ранга 2N) блочно-диагонального вида с элементами

$$\hat{g}(\vec{k}) = \begin{vmatrix} a\lambda_1(\vec{k}) & b(\lambda_1(\vec{k})\lambda_2(\vec{k}))^{1/2} \\ b(\lambda_1(\vec{k})\lambda_2(\vec{k}))^{1/2} & a\lambda_2(\vec{k}) \end{vmatrix}, \quad (25)$$

где $a = c(1-c) - \eta^2/4$, $b = \eta(1-2c)/2$. Использование (24), (25) и (18) приводит к формуле

$$\Delta F^k = \frac{1}{2} \chi T \sum_{\vec{k}} \ln \left\{ 1 + 2\beta a V_{11}(\vec{k}) + \beta^2 (a^2 - b^2) [V_{11}^2(\vec{k}) - V_{12}^2(\vec{k})] \right\}. \quad (26)$$

Фурье-компоненты параметров корреляции определяются из равенств

$$\begin{aligned}\varepsilon_{11}(\vec{k}) &= C^{-1}(\vec{k}) \left[2a + 2\beta(a^2 - b^2) V_{11}(\vec{k}) \right] \\ \varepsilon_{12}(\vec{k}) &= 2C^{-1}(\vec{k}) \beta(b^2 - a^2) V_{12}(\vec{k}),\end{aligned}\quad (27)$$

где $C(\vec{k}) = 1 + 2\beta a V_{11}(\vec{k}) + \beta^2(a^2 - b^2) [V_{11}^2(\vec{k}) - V_{12}^2(\vec{k})]$

Фурье-компоненты параметров корреляции, определяемые формулами (12) или (27), могут быть непосредственно связаны с абсолютной интенсивностью диффузного рассеяния рентгеновских лучей $I_{\text{дифф.}}(\vec{k})$ [8].

Таким образом, измеряя $I_{\text{дифф.}}(\vec{k})$ в различных точках обратного пространства, могут быть определены как параметры корреляции, так и потенциалы межатомного взаимодействия.

В заключение авторы благодарят Э.М.Казаряна за обсуждение полученных результатов.

Кафедра общей физики

Поступила 8.06.1988

ЛИТЕРАТУРА

1. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М.: Наука, 1977, 255с.
2. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теория упорядочивающихся сплавов. М.: Физматгиз, 1958, 388 с.
3. Муто Т., Такаги Ю. Теория явлений упорядочения в сплавах. М.: ИЛ, 1959, 154 с.
4. Бадалян Д.А., Хачатурян А.Г. Учет корреляции в упорядочиваемом бинарном твердом растворе. - ФТТ, 1970, т.12, с.439-447.
5. Kirkwood J.G. Order and disorder in binary solid solutions. - J.Chem. Phys., 1938, v.6, p. 70-75.
6. Бадалян Д.А., Мурадян А.А. Применение диаграммного метода в статистической теории ближнего порядка в упорядочивающихся бинарных сплавах. - Уч. зап. ЕГУ, 1988, №2.
7. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974, 384с.
8. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967, 336с.

Ամփոփում

Օղակաձև դիագրամների մոտավորությամբ կառուցված է կամայական ստրուկտուրայով և բաղադրությամբ մետաղական երկբաղադրիչ կարգավորվող համաձուլվածքներում մերձակա կարգի էֆեկտների միկրոսկոպիկ տեսությունը: Ստացված արդյունքները կիրառելի են ատոմների փոխազդեցության կամայական շառավղի դեպքում: Դիտարկված են կոռելյացիոն էֆեկտները Fe_3Al և հեքսագոնալ AB տիպի գերստրուկտուրաներում:

SUMMARY

In the ring-diagram approximation a microscopic theory has been developed for short-range effects in metallic ordering binary alloys with arbitrary structure. The configurational free energy of an alloy has been obtained, applicable for systems of arbitrary composition and interatomic interaction radius. As a specific application of the theory the correlation effects have been considered in Fe_3Al and AB type superstructures.