Метрика ближнего порядка в упорядочивающихся сплавах

Более детальный подход — подсчет числа конфигураций, возможных в данной структуре и при данной заселенности подрешеток, т.е. заданном значении дальнего параметра порядка. Рассмотрим упрощенный подход, не рассматривая геометрию конфигурации, а рассматривая только число пар атомов разного сорта.

 Q_{AB} — числом правильных пар атомов, то есть пар, в которых атом A находится на подрешетке α , а атом B на подрешетке β .

 Q_{BA} — числом неправильных пар: атом A — на подрешетке β , атом B — на подрешетке α .

Доля смешанных пар типа АВ (ВА) есть:

$$q = (Q_{AB} + Q_{BA})/Q,$$

где
$$Q$$
 – полное число пар: $Q=Q_{AB}+Q_{BA}+Q_{BB}+Q_{AA}=Nz_{I}/2$.

Число ближайших соседей z_1 в первой координационной сфере будем предполагать одинаковым для подрешеток структуры.