

УКРАЇНЬСЬКА АКАДЕМІЯ НАУК  
ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

На правах рукопису

ШЕРСТЕНІКОВ Юрій Всеволодович

АТОМНЕ УПОРЯДКУВАННЯ В ТРЬОХКОМПОНЕНТНИХ СПЛАВАХ.  
ВПЛИВ ТЕПЛОВИХ КОЛІВАНЬ РЕШІТКИ ТА МАГНІТНИХ  
ВЛАСТИВОСТІВ КОМПОНЕНТІВ

01.04.07 - фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на пошук ученої степені  
кандидата фізико-математичних наук

№ 26.445

Дисертаційна робота виконена в Дніпропетровському гірничому інституті

Научні керівники:

доктор фізико-математичних наук В.М.Даніленко

кандидат фізико-математичних наук І.П.Гаркуша

Інші опоненти:

доктор фізико-математичних наук Ю.М.Горячев

доктор фізико-математичних наук В.І.Рижков

Наукова організація:

Дніпропетровський державний університет

Захист відбудеться "23" февреля 1993 р. по 14 годині.  
на засіданні спеціалізованої ради в  
Інституті проблем матеріалознавства Української АН за  
адресою: 252680, г. Київ, вул. Крижановського, 3, ІПМ АН Укр.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інститута проблем матеріалознавства Української АН

Автореферат розіслан "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 1992 р.

Учений секретар спеціалізованої ради

ЛІНБ ім. В. Стефаніка  
АН УРСР  
В.Б.Падерно

ЛІНБ України ім. В. Стефаніка



00814477

## I. ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність проблеми. Важливою проблемою в фізиці твердого тіла є вивчення механізму формування структури багатоконпонентних сплавів і впливання на цей процес таких факторів, як магнітні властивості компонентів і теплові коливання ґратки. Дослідження даної проблеми дозволяє намітити шляхи цілеспрямованого змінення технологічних властивостей матеріалів. На теперешній час створена достатньо загальна квантостатистична теорія кристалічних твердих тіл, котра дозволяє досліджувати як двокомпонентні, так і багатоконпонентні системи. Незважаючи на значні успіхи в розробці теорії, існує ряд проблем, що вимагають найдалшого розвитку. Якщо квантостатистична теорія подвійних металічних фаз з упорядкованим розташуванням атомів на сучасному етапі квантостатистичних уявлень досягла логічного завершення, квантостатистична теорія багатоконпонентних систем знаходиться на значно попередній стадії розвитку. Одне з важливих напрямків розвитку статистичної теорії – це теорія статичних концентраційних хвиль (СКХ). Для трійних систем, ця теорія розвинута недостатньо. Крім того, для фазової рівноваги, крім прямих міжатомних взаємодій, важливі обмінні сили приводячі до магнетизму металів та сплавів, а також коливання кристалічної ґратки. Тому метою теперешньої праці з'являється:

- облік теплових коливань в теорії упорядкування;
- побудова статистичної моделі дозволяючої аналізувати упорядкування в усіх структурах потрібних сплавів на базі ПЦК і ОЦК ґраток;
- розрахунок магнітного вкладу в теплоємність сплавів  $Fe-Cr$ ;
- розрахунок температури фазового переходу  $82 \rightarrow 203$  для сплава  $Fe-Ni-Al$  при змістовності  $Ni$  1 + 3 ат. %.

Научна новизна. Вперше: а) виконано узагальнення методу СКХ, що дозволяє враховувати коливання кристалічних ґраток на процес упорядкування; проведено розрахунок температури упорядкування для 16 сплавів; б) отримані узагальнені порівняння для рівновагових значень, параметрів порядку трьохкомпонентних сплавів; в) отриман критерій того, що фазовий перехід порядок-порядок є фазовий перехід другого роду; г) метод статичних концентраційних хвиль застосовується для дослідження зв'язку процесів аморфізації і упорядкування сплавів; д) виконано уза-

гальнення статистичної теорії упорядкування на кристалічних ґратках з трьома типами геометрично нееквівалентних узлів; є) в рамках теорії СКХ доведено, що взаємодіють між собою тільки хвилі атомного та магнітного упорядкування, які відносяться до однієї зірки надструктурних хвильових векторів; ж) проаналізований вклад в теплоємність  $Fe-Cr$ ; з) розрахована вільна енергія  $d$ - та  $f$ -фаз заліза.

Практична цінність. Получені нові теоретичні висновки відкривають додаткові можливості методу СКХ, що стосуються до багатоконпонентних сплавів. Ці наслідки дозволяють урахувувати вплив коливань кристалічних ґраток на процес упорядкування пояснюють ряд принципових аспектів взаємного впливу атомного та магнітного упорядкування.

Данні дослідження цікаві з точки зору розробки технологій отримання сплавів з даними властивостями.

Захисні положення:

- теплові коливання дають внесок в температуру упорядкування сплаву;
- порівняння, що виявляють рівноважні значення параметрів дальнього порядку у самоузгодженом наближенні одночасно застосовані до надструктур  $L1_0$ ,  $L1_0 (M=I)$ ,  $L1_2$ ,  $B2$ ,  $B32$ ,  $L1_3$ ,  $DO_{22}$ ,  $DO_3$ ,  $L1_4$ ,  $C_{Ni}$ ;
- метод СКХ застосовано до аморфізуючих сплавів;
- взаємодіють між собою хвилі атомного та магнітного упорядкування, що відносяться до однієї зірки надструктурних хвильових векторів;
- малі добавки  $Ni$  підвищують температуру упорядкування сплаву  $Fe-Al$  при концентраціях  $Al$  менших 26% і підвищують при більш високих концентраціях  $Al$ ;
- квазикласичне наближення моделі Гейзенберга застосовується при розрахунку магнітного вкладу в термодинамічні функції сплава  $Fe-Cr$  для температур  $T < T_c$ .

Публікації. По темі дисертації опубліковані роботи /1 - 4/. У цих роботах автор розробив метод і виконав розрахунок температури упорядкування з обліком вкладів теплових коливань для 16 сплавів; запропонував модель для спільного описання аморфізації сплаву; виконав розрахунок магнітного вкладу в теплоємність сплаву  $Fe_{0.73}Cr_{0.11}$ ; запропонував метод апроксимації магнітного вкладу в теплоємність заліза при температурах Кюри

і виконав розрахунок вільної енергії  $\alpha$ - та  $\beta$ -фаз заліза.

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, чотирьох глав і заключення. Вона включає 140 сторінок у тому числі три таблиці і 11 малюнків, та бібліографічний список із 146 назв.

Введення вміщує спільну характеристику роботи.

Глава перша присвячена огляду літератури по статистичній теорії трьохкомпонентних систем. При цьому основна увага виділялась самоузгодженому наближенню, що летить в основі метода статичних концентраційних хвиль.

В главі II отримані: гамільтоніан концентрон-фононної взаємодії, узагальнення методу СКХ для обліку теплових хвиль ґраток, проведено розрахунок температури упорядкування для 16 сплавів з обліком вклада теплових коливань.

Глава III присвячена розвитку метода СКХ, що стосується трьох та багатокомпонентних сплавів. Отримано узагальнене порівняння для визначення рівноважних значень параметрів порядку зверхструктур на базі ГЦК и ОЦК ґраток.

Метод СКХ застосовується для аморфізуючихся сплавів. Виконан розрахунок переходу  $B2 \leftrightarrow DC_3$  в сплаві  $Fe-Ni-Al$ . Побудована статистична теорія  $\sigma$ -фази  $Fe-Cr$ .

В главі IV досліджується взаємний вплив атомного і магнітного упорядкування у взаємоузгодженому наближенні. Виконан розрахунок магнітного вкладу в теплоємність сплаву  $Fe_{0.79}Cr_{0.21}$ . Проведено розрахунок магнітного вкладу в енергію Гіббса  $\alpha$ - та  $\beta$ -фаз заліза.

В заключенні сформульовані основні результати роботи.

## П. СТАН ПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

Проведений в розділі I огляд літератури показує, що не дивлячись на виконані кількома авторами глибокі та змістовні роботи по застосуванню самоузгородженого наближення і розвинутого на його основі методу СКВ до багатокомпонентних сплавів в теорії є ряд прогалин.

Теорія упорядкування сплавів в методі СКВ традиційно розвивалась в наближенні нерухомої кристалічної ґратки. Ця обставина виключила можливість врахування теплових коливань при

дослідженні упорядкування. В цей же час паралельно (й одночасно) з методом СКВ розвивалась статистична теорія кристалічних тіл (Базаров), яка ґрунтується на методі функцій розподілення Боголюбова. Поскільки самоузгоднене наближення теорії Базарова по смислу еквівалентне наближенню середнього поля, лежачого в основі методу СКВ, то виникла необхідність об'єднання вказаних теорій. Рішення цієї задачі склало зміст розділу II.

Традиційна критика статистичних теорій заключається перед усім, у відсутності загальності теорій. В цьому є одна з переваг термодинамічного аналізу. Задача статистичної теорії впорядкування, в цьому зв'язку, заключається в виробі універсальних методів, які дозволяють єдиним образом описувати найбільше число систем. Так, статистичні теорії впорядкування типу Горського-Брегга-Вільямса, при приміненні до конкретних структур, приходиться розвивати по-суті з самого початку. Окрім цього, ця теорія не в стані відповісти на запитання, як по виду потенціалів міжатомної взаємодії визначити структуру впорядкованої фази. В деякій мірі ці труднощі долаються в методі СКХ. У роботах В.І. Рижкова із співавторами, присвячених статистичній теорії трьох- і багатокомпонентних сплавів, система рівнянь для визначення рівноважних значень параметрів порядку представлена у вигляді

$$\ln \left[ \frac{P_{d'}(r')}{1 - \sum_{d'_+} P_{d'_+}(r')} \right] = \frac{1}{k_B T} \left\{ \mu_{d'} - \mu_{m'} + \sum W_{dd'_+}(r', r'_+) P_{d'_+}(r'_+) + \right. \\ \left. + \sum_{r'_+} \sum_{d'_+} W_{dd'_+}(r', r'_+) P_{d'_+}(r'_+) \right\},$$

$$\ln \left[ \frac{P_{d^o}(r^o)}{1 - \sum_{d^o_+} P_{d^o_+}(r^o)} \right] = \frac{1}{k_B T} \left\{ \mu_{d^o} - \mu_{m^o} + \sum_{r^o_+} \sum_{d^o_+} W_{dd^o_+}(r^o, r^o_+) P_{d^o_+}(r^o_+) + \right. \quad (I)$$

$$\left. + \sum_{r^o_+} \sum_{d^o_+} W_{dd^o_+}(r^o, r^o_+) P_{d^o_+}(r^o_+) \right\},$$

де параметри дальнього порядку  $Q(k)$  утримуються у визначенні імовірностей

$$P_2(r) = c_2 + \sum_k e^{ikr} Q(k).$$

Решту позначень приведено в<sup>\*</sup>.

Система (I) дозволяє єдиним образом описувати впорядкування різних багатокомпонентних сплавів як заміщення, так і проникнення довільного складу з врахуванням далекодійоюї між-атомної взаємодії. Система рівнянь (I) відображає загальний стан статистичної теорії впорядкування на сьогоднішній день. З однієї сторони, теорія вже досягла визначеної загальності, з другої - система рівнянь типу (I) при застосуванні до конкретних структур (надструктур) потребує подальших аналітичних перетворень. У цьому зв'язку виникає потреба такого побудування теорії, щоби статистична теорія одночасно могла бути застосована до можливо більш широкого класу систем і в цей же час отримувати в ній рівняння були би безпосередньо доступні для числового аналізу (на ЕВМ) і не потребували би подальших перетворень.

Окрім цього, вимога логічної завершеності статистичної теорії впорядкування приводить до необхідності постановки і рішення слідуєчих задач:

- загальне термодинамічне дослідження фазових переходів в трьохкомпонентних сплавах на основі вибраної статистичної моделі;
- аналіз низькотемпературної стабільності трьохкомпонентних сплавів;
- симетрійний аналіз фазових переходів порядок-порядок (низькотемпературна фаза описується додатковим параметром порядку);
- узагальнення методу СКВ на магнітовпорядковані системи і дослідження взаємного впливу атомного і магнітного впорядкувань;
- побудова статистичної теорії, яка описує взаємозв'язок аморфізації та впорядкування.

<sup>\*</sup> Рыжков В.И. Теория упорядочения многокомпонентных сплавов в приближении самосогласованного поля // ФММ.-1976.-Т.41, №1.-с.7-18.

### III. ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Велике число теоретичних робіт, виконаних в статистичній теорії впорядкування в безкорреляційному наближенні (переважно в методі Горського-Брегга-Вільямса) приводять до висновку про реалістичність цього наближення. Послідовно розвиваєме безкорреляційне наближення може бути отримане як самоузгоджене наближення моделі Ізінга. Та роль, яку грає самоузгоджене наближення в статистичній теорії впорядкування приводить до необхідності його подальшого розвитку і систематизації. Реалізація деяких аспектів цієї задачі присвячений основний зміст роботи.

#### Теплові коливання і впорядкування

В результаті загального квантовомеханічного аналізу з повного багаточасткового гамільтоніана електрон-іонної взаємодії виділено гамільтоніан, описуючий електрон-концентр-фононну взаємодію. Вперше отримано і проквантовано гамільтоніан концентр-фононної взаємодії, який дозволяє дослідити вклад теплових коливань в процес впорядкування. Перехід до наближення парного потенціалу, приводить до статистичної теорії, описуючої наряду з коливаннями кристалічної ґратки також і атомне впорядкування. Уявивши функцію розподілення  $\rho(q)$  методу функцій розподілення Боголюбова у вигляді

$$\rho_a(q) = \sum_R n_a(R) \zeta_a(q-R),$$

де

$$\zeta_a(q) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\beta} u_a(q-R)\right\}}{\int_{\mathbb{R}^3} \exp\left\{-\frac{1}{\beta} u_a(q)\right\} dq},$$

$$u_a(q) = \sum \int \tilde{V}_{ab}(|q-q'|) \rho_b(q') dq',$$

$a, b$  - сорт атомів ( $a, b = A, B$ );  $q$  - координата в прямому просторі,  $\psi_R$  - область, в якій сконцентровано рух атому в вузлі  $R$ ;  $\theta = k_B T$ ;  $V_{ab}$  - парний міжатомний потенціал; вільну енергію сплаву в самоузгодженому наближенні можна записати як

$$F_{en} = \theta \sum_R \{n(R) \ln n(R) + [1-n(R)] \ln [1-n(R)]\} + \\ + \theta \sum_R \{[1-n(R)] \bar{\xi}_a + n(R) \bar{\xi}_b\} + \frac{1}{2} \sum V(R-R') n(R) n(R') \quad (2)$$

Тут

$$\bar{\xi}_a = \int \xi_a(q) \ln \frac{\xi_a(q)}{e} dq, \quad n(R) = n_a(R),$$

$$V(R-R') = V_{AA}(R-R') + V_{BB}(R-R') - 2V_{AB}(R-R'),$$

$$V_{ab}(R-R') = \iint_{\psi_R \psi_{R'}} \tilde{V}_{ab}[R-R' + (x-y)] \xi_a(x) \xi_b(y) dx dy.$$

Вираз (2) являє собою узагальнення вільної енергії методу СГХ. Вільна енергія у формі (2) дозволяє врахувати теплові коливання у теорії впорядкування. Виходячи із (2) отримуємо температуру впорядкування сплаву:

$$T = T_0 \frac{1}{1 - \frac{3}{2} \chi c(1-c)}, \quad (3)$$

де  $T_0^{(c)}$  - температура впорядкування, величина  $\chi$  визначається

ся жорсткість потенціалів парної міжатомної взаємодії. По виразу (3) виконан розрахунок відношення  $T_0/T_0^{(k)}$  для 16 сплавів:  $CuZn$ ,  $CuAu$ ,  $CuPt$ ,  $NiZn$ ,  $NiAl$ ,  $FeAl$ ,  $FePt$ ,  $TiZn$ ,  $RaTi$ ,  $RaZr$ ,  $RaHf$ ,  $RaV$ ,  $RaW$ ,  $RaTa$ ,  $JrTi$ ,  $JrZr$ .

Тут видно, що для сплаву  $CuAu$  максимальне відхилення  $T_0$  від  $T_0^{(k)}$ , яке досягається біля 30%  $Au$  складає 1%. Тим часом для сплавів  $FeAl$ ,  $NiAl$ ,  $RaZr$ ,  $CuPt$  це відхилення складає від 10 до 14%.

#### Статистична модель впорядкування в самоузгодженому наближенні

Дослідження стійкості однорідного трьохкомпонентного твердого розчину відносно утворення нескінечно малих концентраційних неоднорідностей показують, що математична структура першого незникаючого члена флюктуації вільної енергії еквівалентна такому самому виразу для двухкомпонентного твердого розчину у випадку, якщо кристалічна ґратка останнього має базис. Це дозволяє зробити наступні затвердження відносно впорядкування трьохкомпонентних сплавів: 1) фур'є-розклад концентраційних хвиль вмістить у собі всі хвильові вектори, які належать до зірки, зв'язаної з впорядкуванням; 2) перехід порядок-непорядок можливий як фазовий перехід II роду лише в тому випадку, якщо із векторів зірки, яка зв'язана з фазовим перетворенням, не можливо вибрати три (не обов'язково різних) вектори, сума яких би дорівнювала нулю, або вектору зворотної ґратки неупорядкованої фази.

Подальший симетрійний аналіз показав, що у випадку переходів порядок-порядок для того, щоб розглянутий перехід міг бути фазовим переходом другого роду до умови 2) необхідно додати ще умову, яка накладає обмеження на хвильові вектори зірок обоїх впорядкованих фаз: 3) фазовий перехід порядок-порядок, при якому виникає структура, яку можна описати додатковим (другим) параметром порядку може бути переходом другого роду лише в тому випадку, якщо поряд з умовою 2) виконується умова:

$$K_i^{(1)} + K_{j_1}^{(2)} + K_{j_2}^{(2)} + K_{j_3}^{(2)} \neq 0,$$

при будь-якому  $K_i^{(1)}$  і будь-яких (не обов'язково різних)  $K_{j_i}^{(2)}$ ,

$$K_{j_2}^{(2)} \text{ і } K_{j_2}^{(2)}.$$

При дослідженні трьохкомпонентного розчину заміщення А-В-С був отриманий аналог системи порівнянь (I) в такому вигляді:

$$\sum \epsilon_j W_{\alpha\beta}(K_j) \eta_j^b + K_{\epsilon} T \sum_{\ell=1}^p \epsilon_{\ell}^a \ell_{\ell} \frac{c_{\alpha} + \sum_{j'} \eta_{j'}^a \epsilon_{j'}^a}{1 - c_{\alpha} - c_{\alpha} - \sum_{j'} (\eta_{j'}^a - \eta_{j'}^b)} \eta_j^a = 0 \quad (4)$$

Тут  $j = 1, 2$ ;  $\alpha, \beta = A, B$ . Систему (4) одночасно можна висувати для надструктур  $L_1^a, L_1^b (M=1), L_2, B2, B32, L_3, DO_{22}, DO_3, L_1, C_{118}$ . Причому параметри  $\epsilon_j, \epsilon_{\ell}^a$  і  $\eta_{\ell}^a$  розраховуються для всіх назначених надструктур наперед. Система (4), на відміну від (I), не потребує в подальших аналітичних перетвореннях і може використовуватися в чисельних розрахунках.

Розрахунок температури фазного переходу  $T_0^{(2)}$  для системи  $Fe - Ni - Al$  при визначенні параметрів порядку із системи (4) веде до наступного висновку. При невеликих концентраціях нікеля ( $I + 3\%$ ) температура фазного переходу  $B2 \leftrightarrow DO_3$  при  $C_{Ni} = 26\%$  знижується із збільшенням  $C_{Al}$ , а при  $C_{Al} = 26\%$  - підвищується.

Відомо, що стан металевого скла реалізується, як правило, не в чистих металах, а в сплавах. В цьому зв'язку виникає практична необхідність в розробці єдиної моделі, яка описує впорядкування і аморфізацію. В роботі пропонується модель аморфного сплаву в самоузгодженому наближенні, яка може розглядатися як узагальнення моделі методу СХХ. Ця модель приводить до правдивих висновків про те, що краще склуться розпадаючі, а не упорядковані сплави: 2) більш переважним є скловання пари "метал-металоїд", а також компонентів, максимально рознесених в таблиці Менделєєва.

Однією з важливих задач теоретичного дослідження фазових рівноваг надструктур є їх дослідження низькотемпературної стабільності. Для двухкомпонентних сплавів розроблен метод вирішення цієї задачі для стехіометричних сплавів (Д.М. Штерн, А.В. Козлов). Узагальнення цього методу на трьохкомпонентні сплави веде до наступних висновків. Введемо поряд з енергетичними параметрами  $W_{\alpha\beta}^{(i)}$ , які описують взаємодію атомів сорту  $\alpha$  і  $\beta$  на  $i$ -координатній сфері, - енергетичні параметри  $U_i$

$$U_i = \sum_{ab} W_{ab}^{(i)} \eta_n^a \eta_m^b$$

Тоді області стабільності і метастабільності надструктур в просторі енергетичних параметрів  $U_i$  для трьохкомпонентних сплавів будуть еквівалентні відповідним двохкомпонентним сплавом в просторі енергетичних параметрів  $W^{(i)}$ .

Статична теорія  $\sigma$ -фази, яка має три типи нееквівалентних вузлів.\* Один з висновків, який може бути зроблений із теорії, полягає в тому, що фазовий перехід неупорядкований твердий розчин  $\leftrightarrow \sigma$ -фаза Fe-Cr являє собою перехід другого роду.

На основі прийнятої моделі виконан загальний термодинамічний аналіз фазових переходів (без зміни складу) в ОЦК і ЦЦК ґратках.

### Магнітні ефекти

Для спільного дослідження атомного і магнітного впорядкування пропонується використовувати самоузгоджене наближення узагальненої моделі Ізінга. Гамільтоніан системи атомів сорту  $A$  і  $B$ , які знаходяться в одному з двох можливих спинових станів записується у вигляді:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\substack{R, R' \\ \kappa \ell a \delta}} J_{a\ell}^{\kappa\ell} (R, R') a_{\ell} (R') a_{\kappa} (R) c_a (R) c_{\ell} (R') \quad (5)$$

де  $c_a(R)$  - випадкові числа 0; 1, що описують розташування атомів сорту  $a/a, \beta = A, B/$  по вузлах кристалічної ґратки;  $a_{\kappa}(R)$  - випадкові числа, що описують спинові стани атомів в вузлах ґратки;  $J_{a\ell}^{\kappa\ell}(R, R')$  - парний міжатомний потенціал, що залежить від сортів атомів  $a$  і  $\beta$  в вузлах ґратки  $R, R'$ , так і від спинового стану цих атомів  $\kappa$  і  $\ell$ .

Виходячи з гамільтоніана (5) отримано вираз для вільної енергії моделі Ізінга в самоузгодженому наближенні. Після чого виникає наступна задача: виконати узагальнення теорії СКХ на

\* Смирнов А.А. Общая теория упорядочения сплавов.-Киев: Наук. думка, 1986.-168с.

той випадок, коли наряду з атомним має місце також і магнітне впорядкування. Це узагальнення отримується на основі формальної аналогії між хвилями намагнічування і СКХ, тобто по аналогії з виразом

$$n(R) = c + \sum_j \eta_j \xi_j(R) \quad (6)$$

що описують хвилю концентрованої неоднорідності, записуємо вираз для хвиль намагнічування

$$\phi(R) = \bar{\phi} + \sum_j \mu_j \xi_j(R) \quad (7)$$

Подальший симетричний аналіз показує, що сумування в правих частинах (6) і (7), фактично проходить по одних і тих наборах зірок надструктурних хвильових векторів.

Переходячи в гамільтоніані (5) до самоузгодженого приближення, в якому

$$\langle a_e(R) c_a(R) \rangle = \langle a_e(R) \rangle \langle c_a(R) \rangle$$

приймаючи до уваги (6) і (7) знаходимо, що добуток параметрів порядку  $\eta_j$  і  $\mu_j$  входять в гамільтоніан лише в одичній комбінації:  $\eta_j \mu_j$ . Іншими словами в гамільтоніані немає добутку  $\eta_{j_1} \mu_{j_2}$  при  $j_1 \neq j_2$ . Ця обставина веде до висновку про те, що в самоузгодженому приближенні взаємодіють між собою хвилі концентраційних неоднорідностей і намагнічування, що належать лише одній зірці.

Отримані також температури втрат абсолютної стійкості відносно утворення хвиль впорядкування і намагнічування.

Одна з центральних проблем – що виникає при теоретичному дослідженні магнітних властивостей сплавів, що зміщують  $\mathcal{E}d$  – перехідні метали. Складається в виборі гамільтоніана, що описує обмінну взаємодію. Використана вище модель з гамільтоніаном (5) допускає, що магнітна взаємодія описується модел'ю локалізованих магнітних моментів. Але ця догадка повинна бути розглянена окремо в кожному конкретному випадку.

Так, в роботі виконано розрахунок магнітного внеску в теплоємність сплаву  $Fe_{0,79}Cr_{0,21}$ . В основу розрахунку покладено квазікласичне наближення моделі Гейзенберга в найбільшо анізо-

тропном випадку (модель Ізінга), притому кореляції у системі не враховуються. Виконаний розрахунок привів до хорошого співпадання з експериментальними даними.

При дослідженні сплавів на основі заліза необхідно також враховувати деякі особливості магнітної поведінки  $\gamma$  - фази заліза. Відомо<sup>\*</sup>, що при низьких температурах магнітний момент чистого  $\gamma$  - заліза дорівнює  $0,7 \mu_B$ .

При високих температурах виникає термічне збудження атомів  $\gamma$  - заліза і частина атомів переходить в стан  $\gamma_2$  з моментом наближено рівним  $2,8 \mu_B$ .

На основі цієї моделі виконано розрахунок вільних енергій  $\alpha$  - і  $\gamma$  - фаз заліза і теплоємності приймаючи до уваги  $\alpha \leftrightarrow \gamma$  і  $\gamma \leftrightarrow \gamma_2$  переходи.

В якості конкретизації приведених методів отримана система рівнянь, що визначає фазові рівноваги в сплаві Fe-Cr-Al. Так наприклад отримано вираз для температури Кюрі (в пропозиції що некомпенсований спин атомів заліза і хрома дорівнює 1)

$$T_c = -\frac{2}{3k_B(c_{Fe} + c_{Cr})} \sum_{ab} [J_{ab}(0)c_a c_b + J_{ab}(k_1) \frac{z_1^a z_1^b}{16} + J_{ab}(k_2) \frac{z_2^a z_2^b}{8}]$$

Звідки можна зробити висновок, що впорядкування по різним зіркам веде до незалежних вкладів в температуру Кюрі.

#### IV. ОСНОВНІ ВИСНОВКИ

1. Самоузгодженне наближення моделі Ізінга широко використовує в статистичній теорії впорядкування, є конкретним випадком самоузгодженого наближення методу функцій розподілення Богольובה, що дозволяє врахувати теплові коливання кристалічної ґратки в теорії впорядкування. Метод СКХ можна застосовувати для самоузгодженого наближення методу функцій розподілення. Розрахунок показує, що для багатьох сплавів вклад теплових коливань кристалічної ґратки в температуру впорядкування є досить вагомим.

\* Седоф В.Л. Антиферромагнетизм гамма-железа. Проблема инвара.- М.:Наука, 1987.-288 с.

2. Самоузгоджене приближення моделі Ізінга дозволяє в рамках однієї і тієї системи рівнянь (4) аналізувати впорядкування надструктур:  $L1_0$ ,  $L1_1 (M=1)$ ,  $L1_2$ ,  $B2$ ,  $B32$ ,  $L1_3$ ,  $DO_{22}$ ,  $DO_3$ ,  $L1_4$ ,  $C_{416}$ . Крім того, в цьому приближенні пропонується єдина модель, що описує аморфізацію і впорядкування. Самоузгоджене наближення дозволяє сформулювати критерій, що являє собою необхідну умову того, щоб фазовий перехід був фазовим переходом другого роду.

3. В самоузгодженому наближенні взаємодіють між собою хвилі атомного і магнітного впорядкування, що відносяться до однієї і тієї зірки хвильових векторів. Іншими словами, атомне і магнітне впорядкування будуть мати взаємний вплив лише в тому випадку, якщо підгратка атомного і магнітного впорядкування співпадають. Для сплаву  $FeCr$  при концентраціях до 20% можна використовувати модель Ізінга для опису магнітного вкладу в термодинамічні функції.

4. Розрахунок температури  $T_0$  фазового переходу  $B2 \leftrightarrow DO_3$  для сплаву  $Fe-Cr-Al$  з використанням рівнянь (4) показує, що при концентраціях  $Ni$  1+3% малі добавки  $Ni$  підвищують  $T_0$  при концентраціях алюмінію менше 26% і понижають  $T_0$  при більших концентраціях алюмінію.

#### СПИСОК РОБІТ, ОПУБЛІКОВАНИХ ПО ТЕМІ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Кацнельсон А.А., Шерстенников Д.В. Влияние тепловых колебаний решетки на температуру упорядочения // *Металлофизика*. -1991.-Т.13, №9.-С.125-128.

2. Олемской А.И., Шерстенников Д.В. Модель Изинга-Накано для аморфного сплава// *Изв.вузов. Физика*.-1991, №12.-С.89-93.

3. Шерстенников Д.В., Гаркуша И.П., Хлестун Л.В. Расчет магнитного вклада в теплоемкость сплава  $Fe-Cr$  // *Днепропетр. горн. ин-т* -Днепропетровск, 1991.-4с.-Деп. в УкрНИИТИ №742-Укр91.

4. Даниленко В.М., Гаркуша И.П., Шерстенников Д.В. Полиморфизм железа. Магнитный вклад//*Днепропетр. горн. ин-т*.-Днепропетровск, 1992.-7с.-Деп. в УкрИНТЭИ №630-Укр92.

АНБ Ін. П. Стефаніва  
АНУРСР

1169441

Ав 26.445  
Ав 26.445

Підп. до друку 9.11.90 р. Формат 60x84/16. Папір ове.  
Друк. ове. Умов. друк. л. 841. Умов. фарб.-відб. 0,8/  
Обл.-вид. л. 1,8. Тираж 100 прим. Замовлен. 1

---

Інститут проблем матеріалознавства  
ім. І. М. Францевича АН України  
252680, Київ-680, ДСП, вул. Крижанівського, 3.

Дільниця оперативної поліграфії  
Інституту проблем матеріалознавства  
ім. І. М. Францевича АН України  
252680, Київ-680, ДСП, вул. Крижанівського, 3.