

УДК 538. 662. 13,54—165

ФИЗИКА

В. Е. Адамян

**Метод расчета составов многокомпонентных сплавов с контролируемыми параметрами**

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Д. М. Седракяном 29/VII 1986)

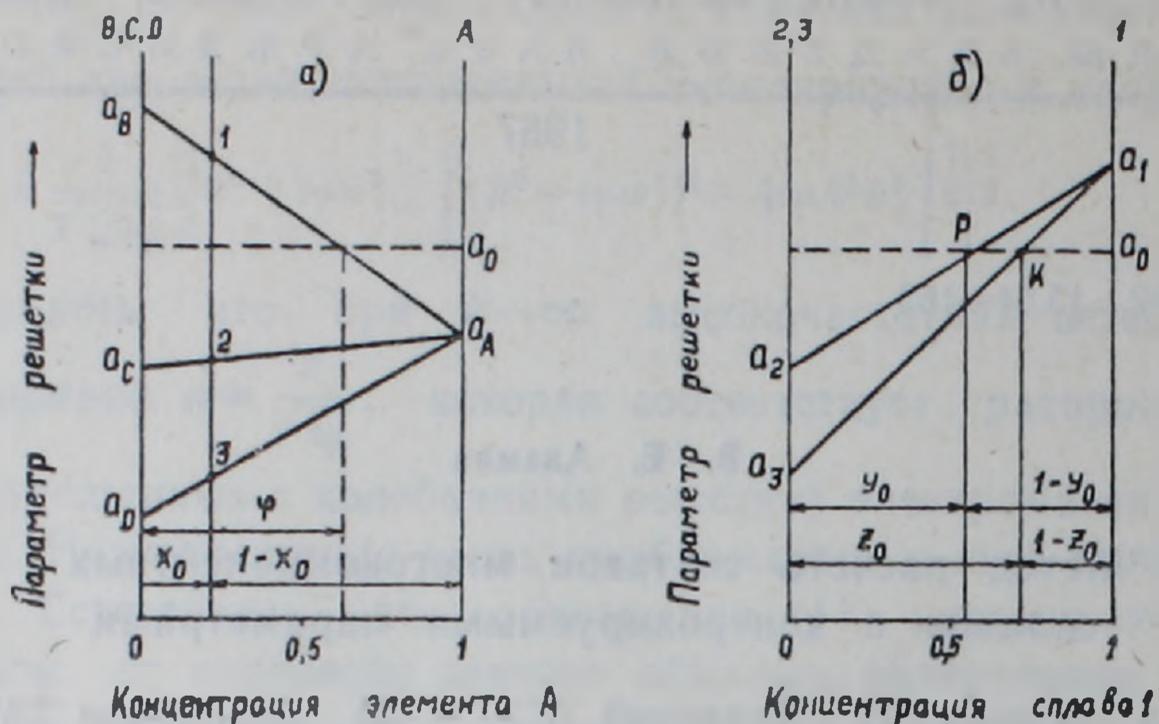
Получение новых материалов с заданными и регулируемые физическими свойствами является одной из важнейших задач научно-технического прогресса. Большую группу применяемых в технике материалов составляют магнитоупорядоченные металлические сплавы и твердые растворы. Их изучение, помимо очевидной практической важности, представляет и чисто научный интерес. Исследуя зависимость магнитных свойств от состава и кристаллической структуры сплавов и соединений, можно ближе подойти к решению проблемы возникновения магнитоупорядоченного состояния.

Обычно в зависимости от поставленной задачи готовятся образцы с различным соотношением компонентов и исследуется зависимость интересующей физической величины от состава. Меняя соотношения компонентов сплава, можно получить различные концентрационные зависимости интересующих физических свойств. Однако в ряду сплавов вместе с концентрацией меняется также и параметр кристаллической решетки, что делает невозможным однозначную интерпретацию полученных результатов<sup>(1,2)</sup>.

В настоящей работе предлагается метод расчета состава многокомпонентных сплавов, в которых желаемым образом, независимо друг от друга можно менять в определенных пределах концентрацию магнитоактивных ионов, параметр решетки, а также концентрацию электронов проводимости (число электронов в элементарной ячейке) для кристаллов с кубической структурой. Суть метода заключается в следующем.

Пусть  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$ —вещества (металлы, соединения или твердые растворы), имеющие кубическую кристаллическую структуру и одинаковые концентрации электронов проводимости. Допустим, далее, что  $A$ —магнитный, а  $B$ ,  $C$  и  $D$ —немагнитные материалы. На рисунке представлена зависимость параметров решетки твердых растворов между магнитным  $A$  и немагнитными материалами  $B$ ,  $C$  и  $D$ .

Пусть надо рассчитать составы различных сплавов с концентрацией магнитоактивных ионов  $x_0$  ( $0 < x_0 < \varphi_0$ ), с параметром кристаллической решетки  $a_0$  ( $a_2 < a_0 < a_1$ ) и с постоянной концентрацией электронов проводимости. Для этого рассмотрим твердые растворы составов  $A_{x_0}B_{1-x_0}$ ,  $A_{x_0}C_{1-x_0}$  и  $A_{x_0}D_{1-x_0}$  (точки 1, 2 и 3 на рисунке, а) с параметрами решеток, соответственно равными  $a_1$ ,  $a_2$  и  $a_3$ . Если те-



Зависимость параметра решетки от состава

перь сделать допущение, что между составами 1—2 и 1—3 образуются также твердые растворы с линейным изменением параметра решетки (см. рисунок, б), то можно найти такое соотношение компонентов  $y_0$  между 1 и 2, при котором параметр решетки равен  $a_0$ .

$$P \equiv (A_{x_0} B_{1-x_0})_{y_0} (A_{x_0} C_{1-x_0})_{1-y_0} = A_{x_0} B_{(1-x_0)y_0} C_{(1-x_0)(1-y_0)}. \quad (1)$$

Подобным образом можно найти соотношение  $z_0$  между 1 и 3 с параметром решетки, равным  $a_0$ .

$$K \equiv (A_{x_0} B_{1-x_0})_{z_0} (A_{x_0} D_{1-x_0})_{1-z_0} = A_{x_0} B_{(1-x_0)z_0} D_{(1-x_0)(1-z_0)}. \quad (2)$$

И наконец, образовав твердые растворы составов  $P_t K_{1-t}$  ( $0 \leq t \leq 1$ ), получим серию многокомпонентных твердых растворов различных составов, в которых концентрация магнитоактивных ионов, концентрация электронов проводимости и параметр решетки — заранее заданные величины:

$$A_{x_0} B_{(1-x_0)y_0 t + (1-x_0)z_0(1-t)} C_{(1-x_0)(1-y_0)t} D_{(1-x_0)(1-z_0)(1-t)}. \quad (3)$$

В случае составов, выражаемых формулами (1) и (2), имеем сплавы, в которых концентрации магнитоактивных ионов и электронов проводимости постоянны, а параметр решетки может меняться от  $a_1$  до  $a_2$  или от  $a_1$  до  $a_3$  с изменением  $y$  и  $z$  от 0 до 1. Для составов, выражаемых формулой (3), при различных  $x$  будем иметь образцы, в которых постоянны параметр решетки и концентрация электронов проводимости при переменной концентрации магнитоактивных ионов.

И наконец, если в случае составов, выражаемых формулой (3), вещества  $A$  и  $B$  (или  $A$ ,  $B$  и  $C$ ) отдают в кристаллическую решетку иное число свободных электронов, чем вещества  $C$  и  $D$  (или  $D$ ), то, как показывают несложные расчеты, мы получаем сплавы, в которых при постоянных концентрациях магнитоактивных ионов и постоянном параметре решетки меняется только концентрация электронов проводимости.

Предложенная методика успешно проверяется на системах твердых растворов  $(R, La, Yb, Y)Zn$ , имеющих структуру типа  $CsCl$ , где

$R^{3+}$  — парамагнитный редкоземельный ион, а  $La^{3+}$ ,  $Lu^{3+}$ ,  $Y^{3+}$  и  $Zn^{2+}$  — диамагнитные ионы.

Ереванский государственный университет

Վ. Ե. ԱԴԱՄՅԱՆ

Ղեկավարվող պարամետրերով բազմակոմպոնենտ համաձուլվածքների  
բաղադրությունների հաշվման մեթոդ

Բերված է բազմակոմպոնենտ համաձուլվածքների բաղադրության հաշվարկի մեթոդ, որոնցում, անկախ իրարից, կարելի է ցանկացած ձևով փոփոխել ինչպես խորանարդային բյուրեղային ցանցի հաստատունը, այնպես էլ մագնիսական իոնների և ազատ էլեկտրոնների խտությունը որոշակի սահմաններում:

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

<sup>1</sup> К. П. Белов, М. А. Белянчикова, Р. З. Левитин и др., Редкоземельные ферро- и антиферромагнетики, Наука, М., 1965. <sup>2</sup> В. Е. Адамян, А. А. Давтян, Г. Г. Закарян и др., ФТТ, т. 20, № 2 (1978).