**Эйшинский, Евгений Роальдович.**
Магнитные и магнитообъемные свойства Fe и Fe-Ni сплавов в модели выделенных состояний атомов железа : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Свердловск, 1984. - 190 с. : ил.

## Введение диссертации (часть автореферата)на тему «Магнитные и магнитообъемные свойства Fe и Fe-Ni сплавов в модели выделенных состояний атомов железа»

Актуальность работы. Изучение свойств железа и его сплавов занимает особое положение в физическом металловедении, поскольку не менее 90$ всех современных конструкционных и инструментальных материалов, а также большое количество материалов со специальными магнитными свойствами изготовляется на основе железа. Уникальным комплексом магнитных, объемных и механических характеристик обладают инварные Fe'Ni сплавы с ГЦК решеткой. Неослабевающий интерес к ним связан как с воцросами чисто прикладного характера, так и с общей проблемой магнетизма сплавов 3 d -элементов.

Основным теоретическим инструментом исследования электронного строения и физических свойств 3 d переходных металлов и сплавов является одноэлектронная зонная теория, достигшая в последние годы высокого математического уровня благодаря разработке эффективных расчетных схем и применению быстродействующих ЭВМ. Вместе с тем некоторые имеющие большое научное и практическое значение вопросы физики сплавов железа, такие как: относительная устойчивость различных полиморфных фаз, взаимосвязь устойчивости с магнитными свойствами фаз и природа аномального магнитообъемного эффекта в инварных Fe-Nl сплавах, вследствие своей сложности, пока еще не могут быть полностью решены в рамках зонной теории и рассматриваются преимущественно с помощью феноменологических моделей.

К наиболее известным из них относится модель двух Jf состояний, предложенная Вейссом и др. которая описывает К (ОЦК ГЦК) структурный фазовый переход в чистом железе и инварные аномалии в ГЦК Fe-Nlсплавах, исходя из представления о существовании у атомов железа в ГЦК решетке двух выделенных электронных состояний с близкими значениями энергии. Такое представление естественным образом стыкуется с более общей конфигурационной моделью электронного строения 3(1 металлов и сплавов, предложенной Самсоновнм и др., согласно которой электронные состояния в различных кристаллических модификациях данных веществ являются статистическими суперпозициями некоторых стабильных электронных конфигураций. Ранее модель двух Jf состояний црименялась исключительно к ГЦК модификации железа и его сплавов. Исследование возможности применения этой модели к , <5 (ОЦК) и £ (ГПУ) полиморфным фазам железа представляет научный интерес.

Пель работы. Основная задача работы заключается в обобщении модели двух X сотояний атомов железа дан сравнительного описания электронного строения и ряда физических свойств , , 5 и £ кристаллических модификаций железа, а также некоторых его сплавов с 3d -элементами.

Научная новизна. В работе впервые показана принципиальная возможность рассмотрения электронного строения и физических свойств полиморфных фаз железа с ГЦК, ОЦК и ГПУ решетками на основе феноменологической модели двух выделенных электронных состояний Fe(o) Fе(2) являющейся обобщением модели Вейсса. При этом параметры модели - атомный объем "V" , атомный магнитный момент JU и изомерный сдвиг 8 ядра S?Fe , считаются независящими от симметрии кристаллической решетки. В рамках предложенной модели найдено, что электронные состояния атомов железа в d , J[ и S фазах, подобно электронным состоялиям атомов редкоземельных элементов в соединениях с переменной валентностью, представляют собой суперпозиции базисных электронных состояний. Различив электронного строения указанных фаз железа определяется разным характером суперпозиций, обусловленным различием статистических весов j- и I- J состояний Fe(0) и Fe(2) в них. В частности, целочисленные отношения весов £ и I-J в ферромагнитном ЫгРе и антиферромагнитном Fe объясняются скоррелированными изменениями электронных конфигураций Fe(o)^ Fe(2) атомов железа, находящихся в соседних узлах вристаллических решеток этих фаз.

Предложена модель, позволяющая рассчитывать изменение электронного состояния атома железа в зависимости от числа N атомов никеля в его первой координационной сфере (I к.с.) и найдено новое значение N =5 минимального числа атомов никеля, мин необходимого для фиксирования атома железа в состоянии ге (2). В рамках этой модели проведен расчет концентрационных зависимостей спонтанной магнитострикцни ж температуры Кюри ГЦК Fe - Ml сплавов.

Практическая ценность. I. Развитое в работе представление о существовании у атомов железа двух выделенных электронных состояний, независящих от симметрии кристаллической решетки, может оказаться полезным для усовершенствования зонных расчетов электронной структуры железа и его сплавов путем введения в математический формализм теории одновременно двух различных электронных конфигураций атомов железа. 2. Найденные численные значения параметров V , JU ,8 состояний Fe(o) и Fe(2) могут быть использованы для определения типа состояния атомов железа в сплавах, не рассматривавшихся в данной работе. 3. Проведенная разработка и численная проверка представления о связи аномального магнитообъемного эффекта в ГЦК Fe-N «- сплавах с изменением при нагреве состояния Fe (2)— Fe^ некоторых критических атомов железа способствует более глубокому пониманию причины инварных аномалий в этих сплавах. Данное представление может быть полезным и при рассмотрении других сплавов железа, обладающих инвар-ными свойствами, например, аморфных сплавов Fe-B .

Автор защищает:

1. Основные положения обобщенной модели двух выделенных электронных состояний атомов железа;

2. Представление о существовании взаимосвязи между целочисленным отношением етатистичнских весов J и I- J состояний

Fcco) в ферромагнитном Fe и скоррелированными друг с другом изменениями электронных конфигураций соседних атомов железа;

3. Способ и результаты расчета концентрационной зависимости относительной доли атомов сорта Fe(2) ж критических атомов железа в Fe~Nl сплавах с ГЦК решеткой;

4. Результаты расчета концентрационных зависимостей спонтанной объемной магнитострикции и температуры Кюри для ГЦК Fe~Nl сплавов;

5. Результаты анализа экспериментальных данных ЯГР исследований инварных ГЦК

Fe-Ni сплавов.

Апробаттия работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на Международной конференции по мартенсит-ным превращениям (Бельгия, 1982), ХУ и ХУ1 Всесоюзных конференциях по физике магнитных явлений (Пермь, 1981, Тула, 1983), III Всеросийском координационном совещании педвузов по физике магнитных материалов (Иркутск, 1984).

Публикатрт- По результатам проведенных исследований опубликовано 10 печатных работ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитированной литературы. Она изложена на 187 страницах машинописного текста, включая 27 рисунков, 9 таблиц и список цитированной литературы из 194 наименований.