

УДК 538.91

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СПЛАВОВ Fe–Al: ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

© 2019 г. М. В. Матюнина^{1, *}, В. В. Соколовский^{1, 2}, М. А. Загребин^{1, 2},
О. О. Павлухина¹, В. Д. Бучельников^{1, 2}

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Челябинский государственный университет”, Челябинск, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, Москва, Россия

*E-mail: matunins.fam@mail.ru

Поступила в редакцию 07.09.2018 г.

После доработки 31.01.2019 г.

Принята к публикации 27.03.2019 г.

В работе из первых принципов проведены исследования структурных и магнитных свойств кристаллических фаз A2, D0₃ и B2 сплавов Fe_{100-x}Al_x (0 ≤ x ≤ 43.75 ат. %). Построена структурная фазовая диаграмма сплавов Fe_{100-x}Al_x. Показано, что в области концентрации x = 3.125–40.625 ат. % выгодной является фаза D0₃, что качественно согласуется с экспериментальной фазовой диаграммой [1].

DOI: 10.1134/S0367676519070263

Функциональные сплавы на основе Fe–Al являются перспективными материалами для промышленного применения благодаря сочетанию таких уникальных качеств как высокая прочность, коррозионная стойкость, низкая плотность и низкая стоимость [2, 3]. Однако применение сплавов Fe–Al ограничено их низкой вязкостью разрушения и пластичностью при температуре окружающей среды, а также низкой прочностью при температуре выше 600°C [4, 5]. Исследования, проведенные в работе [6] демонстрируют положительное влияние очень малых добавок Li и Ni на механические свойства Fe₇₂Al₂₈. Было показано, что добавка Li приводит к повышению пластичности соединения Fe₃Al не только при растяжении, но и в условиях сжатия [6].

В данной работе проведено исследование структурных и магнитных свойств сплавов Fe_{100-x}Al_x (0 ≤ x ≤ 43.75 ат. %) для кристаллических фаз A2, D0₃ и B2 из первых принципов. На эксперименте наблюдаются три кубические фазы: A2 – неупорядоченная структура типа α-Fe, D0₃ – частично или полностью упорядоченная структура типа BiF₃ и B2 – частично или полностью упорядоченная структура типа CsCl [1].

Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP (Vienna *Ab-initio* Simulation Package) [7, 8]. Вычисления проводились с учетом приближения обобщенного градиента в формулировке

Пердью, Бурка и Эрнзерхофа [9]. Моделирование кристаллических структур выполнено с помощью подхода 32-х атомных суперячеек с учетом соответствующих групп симметрии: A2 – *Im-3m* (#229), D0₃ – *Fm-3m* (#225) и B2 – *Pm-3m* (#221). Концентрационные зависимости задавались путем замещения атомов одного сорта другим, при этом замена одного атома соответствует изменению концентрации на 3.125 ат. %. Вычисления проводились при нулевой температуре (*T* = 0 К).

На первом этапе расчетов была выполнена геометрическая оптимизация исследуемых кристаллических фаз A2, D0₃ и B2 сплавов Fe_{100-x}Al_x. Для каждой из исследуемых фаз была вычислена энергия основного состояния *E*₀ и равновесные параметры решеток *a*₀ (соответствующие значению *E*₀). На рис. 1 представлена зависимость атомных объемов исследуемых фаз A2, D0₃ и B2 от концентрации алюминия в сплавах, где $V_{\text{ат}}^{\text{фазы}} = V_{\text{я}}/N$ ($V_{\text{я}} = a_0^3$ – объем элементарной кубической ячейки, *N* – число атомов в элементарной ячейке, *N*_{A2, B2} = 2, *N*_{D0₃} = 16). Как видно из рис. 1, в области концентрации Al *x* = 0–15 ат. % атомный объем фаз A2 и D0₃ линейно увеличивается с ростом концентрации, при этом значения объема для данных двух фаз мало различимы. В области содержания Al *x* > 15 ат. % для решетки A2 значение атомного объема продолжает линейно увеличиваться, в то время как для фаз D0₃ и B2 данный

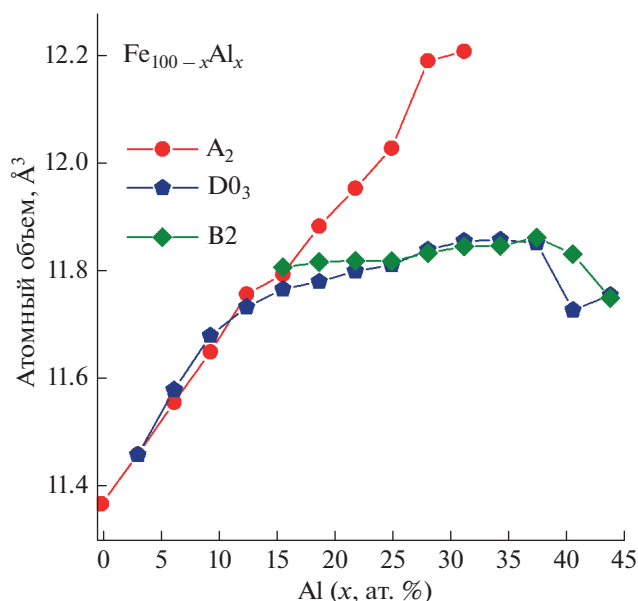


Рис. 1. Зависимость значений атомных объемов кристаллических фаз A2, D0₃ и B2 сплавов Fe_{100-x}Al_x от концентрации Al.

параметр мало изменяется. Такое поведение может быть связано с увеличением степени упорядоченности в кристаллических структурах D0₃ и B2 с увеличением количества атомов Al в рассматриваемых фазах, в отличие от фазы A2.

Величина полного магнитного момента для каждой кубической фазы уменьшается с увеличением содержания Al в сплавах Fe_{100-x}Al_x. Данное поведение обусловлено увеличением концентрации немагнитных атомов Al.

В работе также вычислены плотности электронных состояний для сплавов Fe_{78.125}Al_{21.875} и Fe₇₅Al₂₅. Анализ полных и частичных плотностей электронных состояний сплавов Fe_{78.125}Al_{21.875} и Fe₇₅Al₂₅ показывает, что наличие структурного беспорядка приводит к изменению плотностей электронных состояний вблизи уровня Ферми. Значения спиновой поляризации, рассчитанной по формуле

$$P = (N\uparrow(E_F) - N\downarrow(E_F)) / (N\uparrow(E_F) + N\downarrow(E_F)),$$

где $N\uparrow(E_F)$ и $N\downarrow(E_F)$ – плотности электронных состояний на уровне Ферми для направления спина вверх и вниз, составили для структур A2, D0₃ и B2 сплавов Fe_{78.125}Al_{21.875} (Fe₇₅Al₂₅) – 46 (23), 74 (47) и 53 (53)% соответственно. Наибольшим значением спиновой поляризации обладает структура D0₃ в сплаве с содержанием Al $x = 21.875$ ат. %. Следует отметить, что с дальнейшим увеличением содержания Al до 25 ат. % значение поляризации уменьшается для структур A2 и D0₃, в то время как для структуры B2 остается без изменений. Основной вклад в спиновую поляризацию и в плот-

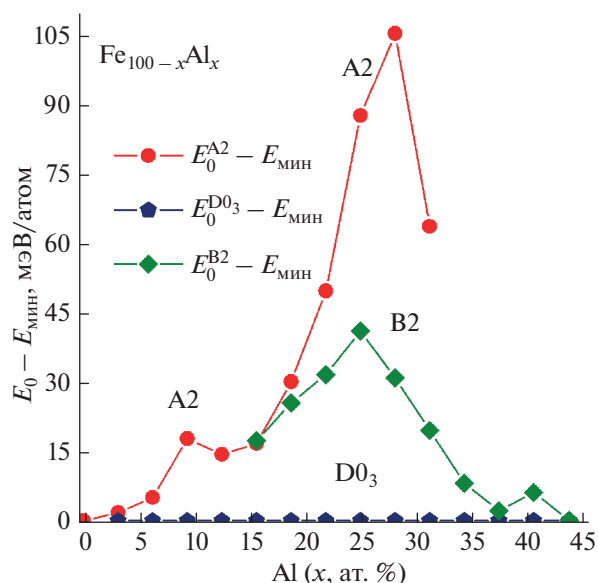


Рис. 2. Разность равновесных значений энергий кристаллических фаз A2, D0₃ и B2, вычисленных по отношению к минимальному значению энергии наиболее энергетически выгодной фазы, в зависимости от концентрации Al для сплавов Fe_{100-x}Al_x.

ность электронных состояний вблизи уровня Ферми вносят t_{2g} -электроны железа.

Согласно полученной фазовой диаграмме (рис. 2) фаза A2 устойчива при $0 < x < 3$ ат. %. Фаза D0₃ является устойчивой в области содержания Al $3 < x < 45$ ат. %. Из эксперимента [10] следует, что область существования фазы D0₃ при низких температурах расширяется. Например, при температуре 400°C D0₃ существует в области $20 < x < 30$ ат. %, а при температуре 300°C в области $15 < x < 30$ ат. %, что позволяет сделать вывод о качественном согласии теоретической и экспериментальной фазовых диаграмм. Из рис. 2 следует, что в области ($x < 15$ ат. %) наблюдается один фазовый переход A2 → D0₃. В области ($x \geq 15$ ат. %) возможна следующая последовательность фазовых переходов: A2 → B2 → D0₃, наблюдаемая экспериментально в диапазоне концентрации $x = 22-35$ ат. % при температурах ниже 600°C [1, 10].

Таким образом, в работе из первых принципов проведено исследование кристаллических фаз A2, B2 и D0₃ сплавов Fe_{100-x}Al_x в широком диапазоне концентраций. Найдено, что равновесные параметры решетки исследуемых фаз увеличиваются с ростом концентрации, в то время как полный магнитный момент демонстрирует убывающее поведение. Построенная на основании сравнения энергий основного состояния E_0 структурная фазовая диаграмма показывает следующую последовательность переходов: A2 → D0₃ при $x < 15$ ат. % и A2 → B2 → D0₃ при $x \geq 15$ ат. %. Полученные ре-

зультаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке гранта № 18-12-00283 Российского научного фонда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kubaschewski O.* Iron – Binary Phase Diagrams. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH, 1982. 185 p.
2. *Knibloe J.R., Wright R.N., Trybus C.L., Sikka V.K.* // J. Mat. Sci. 1993. V. 28. P. 2040.
3. *Johnson M., Mikkola D.E., March P.A. Wright R.N.* // Wear. 1990. V. 140. № 2. P. 279.
4. *Pang X.L., Xing D., Zhang A. et al.* // Intern. J. Mater. Res. 2010. V. 101. P. 865.
5. *Liu C.T., McKamey C.G., Lee E.H.* // Scr. Metallurg. Mat. 1990. V. 24. P. 385.
6. *Rosas G., Esparza R.G., Bedolla -Jacuinde A., Pérez R.* // J. Mater. Engin. Perform. 2009. V. 18. P. 57.
7. *Kresse G., Furthmüller J.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
8. *Kresse G., Joubert D.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.
9. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865.
10. *Ikeda O., Ohnuma I., Kainuma R., Ishida K.* // Intermetallics. 2001. V. 9. P. 755.