

LÝ THUYẾT VỀ ẢNH HƯỞNG QUA LẠI GIỮA TRẬT TỰ NGUYÊN TỬ VÀ TRẬT TỰ TỪ CỦA HỢP KIM SẮT TỪ HAI THÀNH PHẦN

Đỗ Chiêu Hà*, Nguyễn Nhật Khanh**

*Trường Cao đẳng Sư phạm TP. Hồ Chí Minh,

**Trường Đại học Khoa học Tự nhiên ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 28 tháng 8 năm 2002)

TÓM TẮT: Bằng cách dùng mô hình nguyên tử trung tâm, chúng tôi tìm năng lượng tự do cấu hình của hợp kim sắt từ hai thành phần, từ đó khảo sát ảnh hưởng qua lại giữa trật tự nguyên tử và trật tự từ.

1. NĂNG LƯỢNG CẤU HÌNH

Năng lượng cấu hình của hợp kim từ được tách thành hai thành phần:

-Phần đầu E_1 là năng lượng trao đổi, cho bởi phương trình (1) (xem [1]):

$$E_1 = - \sum_{\alpha, \alpha' = A, B} J_{\alpha\alpha'} (N_{\alpha\alpha'}^{\parallel} + N_{\alpha\alpha'}^{rr} - N_{\alpha\alpha'}^{lr} - N_{\alpha\alpha'}^{rl}) \quad (1)$$

trong đó $J_{\alpha\alpha'}$ là tham số trao đổi giữa các nguyên tử lân cận α và α' ; $N_{\alpha\alpha'}^{\parallel}$ là số các cặp nguyên tử lân cận α và α' , nguyên tử α có một mômen từ dương, nguyên tử α' có một mômen từ âm. $N_{\alpha\alpha'}^{\parallel}$ và $N_{\alpha\alpha'}^{rr}$ là số các cặp nguyên tử lân cận α và α' theo thứ tự có các mômen từ dương và âm. Nếu bỏ qua tương quan giữa các mômen từ và các chỗ khuyết, ta có các hệ thức sau;

$$N_{\alpha\alpha'}^{\parallel} = N_{\alpha\alpha'} \left(\frac{N^{(l)}}{N} \right)^2 = N_{\alpha\alpha'} \frac{(1+q)^2}{4} \quad (2)$$

$$N_{\alpha\alpha'}^{rr} = N_{\alpha\alpha'} \left(\frac{N^{(r)}}{N} \right)^2 = N_{\alpha\alpha'} \frac{(1-q)^2}{4}$$

$$N_{\alpha\alpha'}^{lr} = N_{\alpha\alpha'}^{rl} = N_{\alpha\alpha'} \frac{N^{(l)} N^{(r)}}{N^2} = N_{\alpha\alpha'} \frac{(1-q)^2}{4}$$

$$N_{\alpha\alpha'} = \frac{N}{2} Z P_{\alpha} P_{\alpha'}(\alpha'), \quad q = \frac{N^{(l)} - N^{(r)}}{N}$$

$N^{(l)}$ là số các nguyên tử có mômen từ dương, $N^{(r)}$ là số các nguyên tử có mômen từ âm, $N^{(l)} + N^{(r)} = N$; $N_{\alpha\alpha'}$ là số các cặp lân cận α và α' ; q là độ từ hoá tương đối của hợp kim; Z là số phối vị. Xác suất nguyên tử α chiếm một nút mạng đã chọn bất kỳ của tinh thể được chỉ bởi P_{α} , $P_{\alpha} = \frac{N_{\alpha}}{N}$; xác suất nguyên tử α' là một lân cận của một nguyên tử α , được chỉ bởi $P_{\alpha}(\alpha')$.

Ta có:
$$\sum_{\alpha, \alpha' = A, B} P_{\alpha}(\alpha') = 1 \quad (3)$$

$$P_{\alpha} P_{\alpha}(\alpha') = P_{\alpha} P_{\alpha'}(\alpha) \quad (\alpha, \alpha' = A, B)$$

Thế (2) vào (1), ta được:

$$E_1 = -q^2 \sum_{\alpha, \alpha' = A, B} N_{\alpha\alpha'} J_{\alpha\alpha'} \quad (4)$$

Sự tương quan giữa các nguyên tử được xác định bởi thông số trật tự gần, được định nghĩa bởi:

$$\sigma = \frac{P_A(B) - P_B}{P_B} \quad (5)$$

Từ các phương trình (2),(3) và (5), ta có:

$$N_{AB} = N_{BA} = \frac{NZ}{2} C_A C_B (1 + \sigma) ,$$

$$N_{AA} = \frac{NZ}{2} C_A (C_A - C_B \sigma) ,$$

$$N_{BB} = \frac{NZ}{2} (C_B^2 - C_A C_B \sigma) = \frac{NZ}{2} C_B (C_B - C_A \sigma) ,$$

$$C_\alpha = \frac{N_\alpha}{N} , \quad \alpha = (A, B) \quad (6)$$

Thế (6) vào (4), ta được:

$$\begin{aligned} E_1 &= -q^2 (N_{AA} J_{AA} + N_{BB} J_{BB} + N_{AB} J_{AB} + N_{BA} J_{BA}) \\ &= -q^2 \frac{NZ}{2} (C_A^2 J_{AA} - C_A C_B \sigma J_{AA} + C_B^2 J_{BB} - C_A C_B \sigma J_{BB} + C_A C_B J_{AB} + C_A C_B \sigma J_{AB} \\ &\quad + C_A C_B J_{AB} + C_A C_B \sigma J_{AB}) \\ E_1 &= \frac{NZ}{2} (-J_0 q^2 - C_A C_B \alpha \sigma q^2) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\text{với: } J_0 = C_A^2 J_{AA} + C_B^2 J_{BB} + 2C_A C_B J_{AB}$$

$$\alpha = 2J_{AB} - J_{AA} - J_{BB}$$

- Phần sau E_2 (không phụ thuộc mômen từ) được tính theo mô hình nguyên tử trung tâm (xem [2]) :

$$E_2 = -\frac{NZ}{2} [C_A v_{AA} + C_B v_{BB} + \frac{(2Z-1)}{Z} \omega p_{AB} - \frac{(Z-1)}{Z} \frac{\beta}{C_A C_B} p_{AB}^2] \quad (8)$$

$$\text{trong đó: } \omega = v_{BA} + v_{AB} - v_{AA} - v_{BB}$$

$$\beta = C_A (v_{BA} - v_{BB}) + C_B (v_{AB} - v_{AA})$$

$$p_{AB} = C_A C_B + b \eta^2 + \varepsilon_{AB} = C_A C_B + b \eta^2 - C_A C_B \sigma$$

$$b = v_a v_b (1 - v_{aa} - v_{bb})$$

Với mạng lập phương thể tâm AB :

$$b = \frac{1}{4} , \quad C_A = C_B = \frac{1}{2} , \quad 2\beta = \omega , \quad Z = 8$$

Với mạng lập phương diện tâm AB₃ :

$$b = \frac{1}{16} , \quad C_A = \frac{1}{4} , \quad C_B = \frac{3}{4} , \quad Z = 12$$

Suy ra năng lượng cấu hình của hợp kim từ hai thành phần:

$$\begin{aligned} E = E_1 + E_2 &= \frac{NZ}{2} (-J_0 q^2 - C_A C_B \alpha \sigma q^2) - \frac{NZ}{2} [C_A v_{AA} + C_B v_{BB} + \frac{(2Z-1)}{Z} \omega p_{AB} \\ &\quad - \frac{(Z-1)}{Z} \frac{\beta}{C_A C_B} p_{AB}^2] \end{aligned} \quad (9)$$

$$\text{trong đó: } J_0 = C_A^2 J_{AA} + C_B^2 J_{BB} + 2C_A C_B J_{AB}$$

2. ENTROPY CẤU HÌNH

Trong các hợp kim sắt từ, $J_0 > 0$. Entropy cấu hình của một hợp kim được cho bởi:

$$S = k \cdot \ln \Omega(\sigma) \quad (10)$$

trong đó k là hằng số Boltzmann và $\Omega(\sigma)$ là hệ số cấu hình:

$$\Omega(\sigma) = h(C_\alpha) \frac{[\frac{N}{2}Z]!N!}{\prod_{\alpha, \alpha'=A,B} N_{\alpha\alpha'}! [N\frac{1+q}{2}]! [N\frac{1-q}{2}]!} \quad (11)$$

Hệ số $h(C_\alpha)$ độc lập với các thông số σ và được xác định bằng cách đặt $\sigma = 0$

$$\Omega(\sigma = 0) = \frac{N!N!}{(NC_A)!(NC_B)! [N\frac{1+q}{2}]! [N\frac{1-q}{2}]!} \quad (12)$$

Ta viết lại phương trình (11) :

$$\Omega(\sigma) = \frac{\prod_{\alpha, \alpha'=A,B} [N_{\alpha\alpha'}(\sigma = 0)]! N! N!}{\prod_{\alpha, \alpha'=A,B} N_{\alpha\alpha'}! (NC_A)!(NC_B)! [N\frac{1+q}{2}]! [N\frac{1-q}{2}]!} \quad (13)$$

3. NĂNG LƯỢNG TỰ DO

Khi phối hợp các phương trình (9),(10) và (13), ta được năng lượng tự do cấu hình F của hợp kim sắt từ hai thành phần:

$$\begin{aligned} F &= E - TS \\ &= \frac{NZ}{Z} (-J_0 q^2 - C_A C_B \alpha \sigma q^2) - \frac{NZ}{2} [C_A v_{AA} + C_B v_{BB} + \frac{(2Z-1)}{Z} \omega p_{AB} - \frac{(Z-1)}{Z} \frac{\beta}{C_A C_B} p_{AB}^2] \\ &+ kTN \{ (\frac{1+q}{2}) \ln(\frac{1+q}{2}) + (\frac{1-q}{2}) \ln(\frac{1-q}{2}) + (1-Z)(C_A \ln C_A + C_B \ln C_B) \\ &+ \frac{Z}{2} [2C_A C_B (1+\sigma) \ln C_A C_B (1+\sigma) + C_A (C_A - C_B \sigma) \ln C_A (C_A - C_B \sigma) \\ &+ (C_B^2 - C_A C_B \sigma) \ln(C_B^2 - C_A C_B \sigma)] \} \end{aligned} \quad (14)$$

trong đó T là nhiệt độ tuyệt đối.

4. ẢNH HƯỞNG QUA LẠI GIỮA TRẬT TỰ GẮN VÀ TRẬT TỰ TỪ

Với một trật tự xa cho trước, ta khảo sát ảnh hưởng qua lại giữa trật tự gắn và trật tự từ.

Các điều kiện để đạt năng lượng tự do cực tiểu:

$$\frac{\partial F}{\partial q} = \frac{\partial F}{\partial \sigma} = 0$$

và cho các phương trình cân bằng sau:

$$\frac{\ln(\frac{1+q}{1-q})}{q} = \frac{2(J_0 + C_A C_B \sigma \alpha) Z}{kT} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{NZ}{2} C_A C_B q^2 \alpha - \frac{NZ}{2} [- \frac{(2Z-1)}{Z} \omega C_A C_B + \frac{(Z-1)}{Z} \frac{\beta}{C_A C_B} 2C_A C_B (C_A C_B + b\eta^2 - C_A C_B \sigma)] \\ & + \frac{kTNZ}{2} C_A C_B [2 \ln C_A C_B (1+\sigma) - \ln C_A (C_A - C_B \sigma) - \ln(C_B^2 - C_A C_B \sigma)] = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

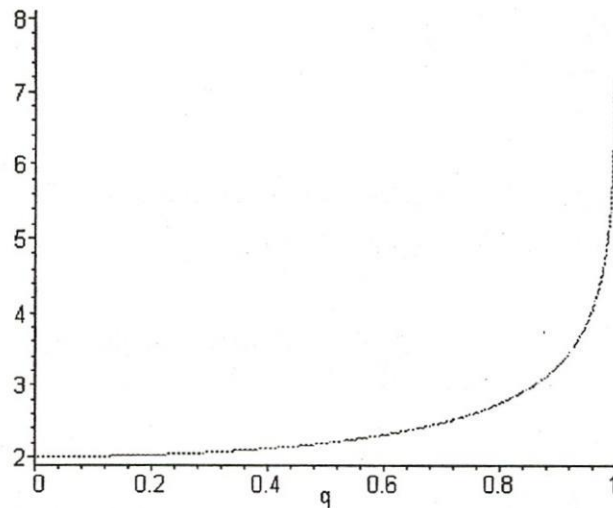
-Nếu $\alpha < 0$ (Thí dụ: Fe_3, Al, \dots):

$$\text{Từ (15): } \frac{\ln\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{q} = \frac{2(J_0 - C_A C_B \sigma |\alpha|)Z}{kT}$$

Từ đồ thị của $y = \frac{\ln\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{q}$, ta thấy: Ở một nhiệt độ T xác định, khi σ tăng thì

$\frac{2(J_0 - C_A C_B \sigma |\alpha|)Z}{kT}$ giảm, suy ra $\frac{\ln\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{q}$ giảm và q giảm. Vậy trong trường hợp này, độ từ hoá (trật tự từ q) và trật tự gần (σ) triệt tiêu lẫn nhau (nghĩa là trật tự gần càng cao thì độ từ hoá càng giảm). Sự "tấn công" của trật tự gần dẫn đến "phá hủy" độ từ hoá.

y



-Nếu $\alpha > 0$ (Thí dụ: Ni_3, Mn, \dots)

$$\frac{\ln\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{q} = \frac{2(J_0 + C_A C_B \sigma \alpha)Z}{kT} \quad (17)$$

Ta suy ra: Ở một nhiệt độ xác định, σ tăng thì q tăng. Vậy trong trường hợp này, độ từ hoá và trật tự gần tăng cường lẫn nhau (trật tự gần tăng thì độ từ hoá tăng).

5. ẢNH HƯỞNG QUA LẠI GIỮA TRẬT TỰ XA VÀ TRẬT TỰ TỪ

Với một trật tự gần cho trước, ta khảo sát ảnh hưởng qua lại giữa trật tự xa và trật tự từ.

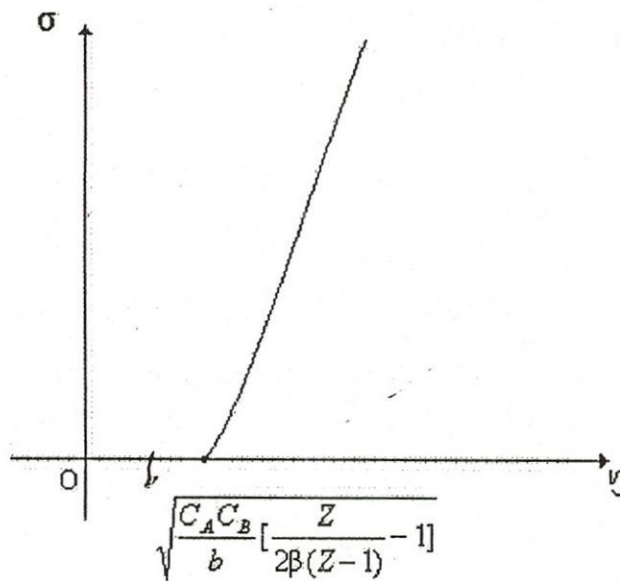
Từ biểu thức năng lượng tự do(14), trong đó: $p_{AB} = C_A C_B + b\eta^2 - C_A C_B \sigma$

và điều kiện năng lượng tự do cực tiểu, ta suy ra các phương trình cân bằng:

$$\frac{\partial F}{\partial q} = 0 : \frac{\ln\left(\frac{1+q}{1-q}\right)}{q} = \frac{2(J_0 + C_A C_B \sigma \alpha)Z}{kT} \quad (\text{giống phương trình 17})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = 0 : \sigma = \frac{b}{C_A C_B} \eta^2 + 1 - \frac{Z}{2\beta(Z-1)} \quad (18)$$

Đồ thị $\sigma(\eta)$:



Ta thấy: Khi η tăng thì σ tăng.

-Nếu $\alpha < 0$ (Thí dụ: Fe_3Al, \dots): σ tăng thì q giảm, nên trong trường hợp này độ từ hoá (trật tự từ q) và trật tự xa (η) phá rối lẫn nhau (nghĩa là trật tự xa càng cao thì độ từ hoá càng giảm).

-Nếu $\alpha > 0$ (Thí dụ: Ni_3Mn, \dots): σ tăng thì q tăng, nên trong trường hợp này độ từ hoá và trật tự xa tăng cường lẫn nhau. Trật tự xa càng cao thì độ từ hoá càng cao.

6. KẾT LUẬN

Trật tự gần, trật tự xa có ảnh hưởng qua lại tới trật tự từ trong hợp kim sắt từ hai thành phần. Tùy thuộc loại hợp kim sắt từ, chúng có thể tăng cường nhau hoặc phá rối nhau.

THEORY OF THE INFLUENCE BETWEEN ATOMIC ORDER AND MAGNETIC ORDER IN FERROMAGNETIC BINARY ALLOYS

Do Chiêu Hà, Nguyen Nhat Khanh

ABSTRACT: By using the central atom model, we are able to calculate the configurational free energy of the ferromagnetic binary alloys, from which we can study the influence between atomic order and magnetic order.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ryzkov B.I., Phys.Met. & Metallurgy (USSR)21(1966),801.
- [2] Đỗ Chiêu Hà, Tạp chí Phát triển Khoa học Công nghệ ĐHQG TP.HCM, Tập 3(2000),48.
- [3] Nguyen Huu Minh, Czechoslovak Journal of Physics B25(1975).