

Расчет фазовых диаграмм систем Dy-Mn, Ho-Mn

Веряева Елена Сергеевна

студентка

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

Факультет Наук о Материалах, Москва, Россия

veryaeva@td.chem.msu.ru

Манганиты редкоземельных элементов, допированные стронцием, перспективны в качестве материалов, проявляющих эффект колоссального магнетосопротивления. В настоящее время это явление положено в основу разработки и проектирования магнитных сенсоров, а также различных магнитных запоминающих устройств. Для теоретического прогноза фазовой и химической устойчивости таких материалов необходимо термодинамическое моделирование четырехкомпонентной системы RE-Mn-Sr-O и входящих в нее систем меньшей размерности. Для систем Mn-O и Sr-O термодинамические модели фаз построены, для систем RE-O и RE-Mn (RE = Dy, Ho) такая информация отсутствует.

Цель настоящей работы - оптимизация термодинамических свойств и условий фазовых равновесий в бинарных системах RE-Mn (RE = Dy, Ho). Помимо указанного выше, металлические подсистемы RE-Mn представляют и самостоятельный интерес, так как в последнее десятилетие сплавы редкоземельных металлов с марганцем рассматриваются как потенциальные высокоэффективные поглотители водорода и азота.

Анализ литературных данных свидетельствует о том, что с точки зрения термодинамики системы RE-Mn изучены недостаточно полно, для твердых фаз литературные данные отсутствуют вообще, а для расплава они ограничены. При построении термодинамической модели жидкости использовали модель субрегулярного раствора:

$$\Delta_{\text{mix}}G \text{ (Дж моль}^{-1}\text{)} = RT\{(1-x)\ln(1-x) + x\ln x\} + x(1-x)(g_{00} + g_{11}(2x-1)),$$

$$g_{00} = 32,0274, g_{10} = 92,5838 \text{ для системы Dy-Mn}$$

$$g_{00} = 291,5349, g_{10} = 276,5084 \text{ для системы Ho-Mn}$$

Так как экспериментально свойства твердых фаз стехиометрического состава Mn_xRE_y с $(x/y) = (12/1)$, $(23/6)$ и $(2/1)$ не изучены, их термодинамические функции находили из условий равновесия конденсированных фаз. Показано, что рассчитанные энтальпии образования сплавов удовлетворительно согласуются с величинами, полученными по модели Миедема [1].

Расчеты проводились с помощью программного пакета PhDi, разработанного в лаборатории химической термодинамики. Результаты расчета фазовой диаграммы системы Dy-Mn представлены на рисунке.

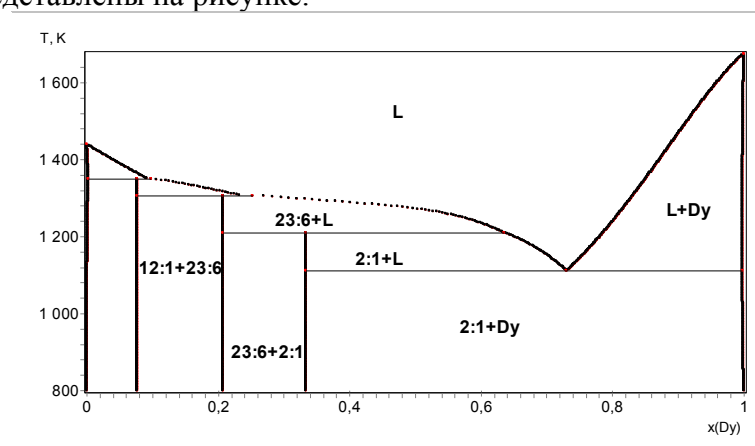


Рис. Фазовая диаграмма системы Dy-Mn

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-03-32963).

[1] A.R.Miedema, P.F. de Chatel, F.R. de Boer / Physica C, 1980, v.100, p.1