

LÍ THUYẾT NHIỆT ĐỘNG CỦA HỢP KIM XEN KỀ AB VỚI CẤU TRÚC B_2

Nguyễn Quang Học, Nguyễn Thiện Thành, Nguyễn Nhật Hoàng, Chu Minh Thu
và Nguyễn Thị Thảo Linh

Khoa Vật lí, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Tóm tắt. Biểu thức giải tích của năng lượng tự do Helmholtz, năng lượng liên kết, các thông số hợp kim, khoảng lân cận gần nhất trung bình và các đại lượng nhiệt động như hệ số dẫn nở nhiệt, các hệ số nén đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, các mô đun đàn hồi đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, năng lượng, entropi, các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp, thông số Grüneisen đối với hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc B_2 dưới tác dụng của áp suất được rút ra bởi phương pháp thống kê mômen. Trong trường hợp giới hạn, ta thu được lý thuyết nhiệt động của kim loại chính A.

Từ khóa: cấu trúc B_2 , hợp kim xen kẽ, thông số hợp kim, khoảng lân cận gần nhất trung bình, phương pháp thống kê mômen.

1. Mở đầu

Việc nghiên cứu hợp kim xen kẽ (HKXK) đã và đang thu hút sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu [1-14]. Các tính chất nhiệt động của các vật liệu là cơ sở của vật lý chất rắn và các ứng dụng công nghiệp. Hơn nữa, các tính chất nhiệt động ở áp suất cao và nhiệt độ cao luôn luôn được sự quan tâm đặc biệt của các nhà vật lý và địa vật lý. HKXK FeSi tồn tại pha B_2 ở áp suất cao và có nhiều ứng dụng khoa học công nghệ quan trọng [1].

Dobson và cộng sự [7] đã thông báo về một pha mới ở áp suất cao của FeSi có cấu trúc B_2 mà nó được tổng hợp bằng một phản ứng nhiệt độ cao của các holonx hợp của Fe và Si tại 24 GPa. Cấu trúc B_2 còn gọi là cấu trúc CsCl, có nhóm không gian $Pm\bar{3}m$ ($Z = 1$) với hằng số mạng $a = 2,7917(1) \text{ \AA}$. Dobson và cộng sự [8] và Ono và cộng sự [9] đã đo hệ số nén của pha B_2 này bằng nhiễu xạ tia X tại các áp suất lên tới 40 GPa và 67 GPa. Hệ số nén của pha B_2 -FeSi đã được tính bằng các phương pháp *ab initio* ví dụ trong [8-11]. Caracas và Wentzcovitch [10] đã thông báo các tính chất cấu trúc và đàn hồi của pha B_2 -FeSi tại các áp suất trong khoảng từ 0 đến 140 GPa.

Trong bài báo này bằng phương pháp thống kê mô men (PPTKMM)[12-14], chúng tôi có thể rút ra biểu thức giải tích của năng lượng tự do Helmholtz, năng lượng liên kết, các thông số hợp kim, khoảng lân cận gần nhất trung bình và các đại lượng nhiệt động như hệ số dẫn nở nhiệt, các hệ số nén đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, các mô đun đàn hồi đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, năng lượng, entropi, các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp, thông số Grüneisen đối với HKXK AB với cấu trúc B_2 dưới tác dụng của áp suất.

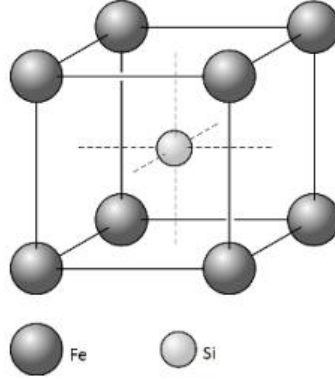
Ngày nhận bài: 20/10/2019. Ngày sửa bài: 16/3/2020. Ngày nhận đăng: 23/3/2020.

Tác giả liên hệ: Nguyễn Quang Học. Địa chỉ e-mail: hocnq@hnue.edu.vn

2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc B₂

Trong HKXK AB với cấu trúc B₂, các nguyên tử kim loại chính A nằm ở các đỉnh, nguyên tử xen kẽ B nằm ở tâm khối. Hình 1 mô tả cấu trúc B₂ của một đại diện của HKXK AB là FeSi.



Hình 1. Cấu trúc B₂ của FeSi

2.2. Năng lượng tự do Helmholtz

Giả sử HKXK AB có nồng độ thành phần thỏa mãn điều kiện:

$$c_B \ll c_A.$$

Năng lượng tự do Helmholtz của HKXK AB với cấu trúc B₂ được xác định bởi

$$\psi = (1 - 9c_B)\psi_A + c_B\psi_B + 8c_B\psi_{A_1} - TS_c \quad (1)$$

trong đó ψ_A là năng lượng tự do của nguyên tử A trong kim loại sạch A, ψ_B là năng lượng tự do của nguyên tử B trong HKXK, ψ_{A_1} là năng lượng tự do của nguyên tử A₁ (nguyên tử A ở đỉnh có chứa nguyên tử xen kẽ B ở quả cầu phối vị thứ nhất) và S_c là entropi cấu hình của HKXK AB. Công thức (1) rút ra từ nhận xét là ứng với 1 nguyên tử xen kẽ B ở tâm khối có 8 nguyên tử A₁ trên quả cầu phối vị thứ nhất với tâm tại vị trí của nguyên tử B. Từ đó suy ra nếu nồng độ nguyên tử xen kẽ B là c_B thì nồng độ nguyên tử A₁ là $c_{A_1} = 8c_B$ và nồng độ nguyên tử A là $1 - c_B - 8c_B = 1 - 9c_B$. Khi nồng độ nguyên tử xen kẽ B bằng không thì năng lượng tự do của HKXK AB trở thành năng lượng tự do của kim loại sạch A. Vì thế các tính chất nhiệt động của HKXK AB trở thành các tính chất nhiệt động của kim loại sạch A trong trường hợp giới hạn $c_B \rightarrow 0$. Nói cách khác, tính chất nhiệt động của kim loại sạch A chỉ là một trường hợp riêng đối với tính chất nhiệt động của HKXK AB.

2.3. Năng lượng liên kết và các thông số hợp kim

Năng lượng liên kết u_0 và các thông số hợp kim k , γ_1 , γ_2 , γ đối với nguyên tử xen kẽ B ở tâm khối của ô mạng lập phương và nguyên tử kim loại chính A₁ (nguyên tử A ở đỉnh của ô mạng lập phương) trong gần đúng hai quả cầu phối vị có dạng

$$u_{0B} = 4\varphi_{AB}(r_{1B}) + 3\varphi_{AB}(r_{2B}), r_{2B} = \frac{2}{\sqrt{3}}r_{1B}, \quad (2)$$

Lí thuyết nhiệt động của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc B₂

$$k_B = 4 \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}^2} + \frac{3}{4} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^2} + \frac{9}{4r_{2B}} \frac{d\varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1B} = & \frac{1}{6} \frac{d^4 \varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}^4} + \frac{1}{2r_{1B}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}} + \frac{3}{128} \frac{d^4 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^4} + \frac{3}{64\sqrt{3}r_{2B}} \frac{d^3 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^3} + \\ & + \frac{21}{128r_{2B}^2} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^2} - \frac{21}{128r_{2B}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2B} = & \frac{d^4 \varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}^4} - \frac{5}{r_{1B}} \frac{d^3 \varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}^3} + \frac{13}{r_{1B}^2} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}^2} - \frac{13}{r_{1B}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{1B})}{dr_{1B}} + \\ & + \frac{3}{8r_{2B}} \frac{d^3 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^3} - \frac{1}{8r_{2B}^2} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}^2} + \frac{1}{8r_{2B}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{2B})}{dr_{2B}}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\gamma_B = 4(\gamma_{1B} + \gamma_{2B}), \quad (6)$$

$$r_{1B} = r_{01B} + y_{0B}(T), \quad (7)$$

$$u_{0A_1} = u_{0A} + \varphi_{AB}(r_{1A_1}), \quad (8)$$

$$r_{1A_1} = r_{01A_1} + y_{0B}(T), \quad (9)$$

$$k_{A_1} = k_A + \frac{16}{3} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^2} - \frac{4}{3r_{1A_1}} \frac{d\varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}}, \quad (10)$$

$$\gamma_{1A_1} = \gamma_{1A} + \frac{8}{27} \frac{d^4 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^4} - \frac{4}{9r_{1A_1}} \frac{d^3 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^3} - \frac{17}{18r_{1A_1}^2} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^2} - \frac{17}{18r_{1A_1}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}}, \quad (11)$$

$$\gamma_{2A_1} = \gamma_{2A} + \frac{16}{9} \frac{d^4 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^4} - \frac{8}{r_{1A_1}} \frac{d^3 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^3} + \frac{59}{3r_{1A_1}^2} \frac{d^2 \varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}^2} - \frac{59}{3r_{1A_1}^3} \frac{d\varphi_{AB}(r_{1A_1})}{dr_{1A_1}}, \quad (12)$$

$$\gamma_{A_1} = 4(\gamma_{1A_1} + \gamma_{2A_1}), \quad (13)$$

r_{01B} là khoảng lân cận gần nhất giữa nguyên tử B với nguyên tử A trong hợp kim ở 0 K và được xác định từ điều kiện cực tiểu của năng lượng liên kết u_{0B} , $y_{0B}(T)$ là độ dịch chuyển của nguyên tử B ở nhiệt độ T , φ_{AB} là thế tương tác giữa nguyên tử A và nguyên tử B. r_{01A_1} là khoảng lân cận gần nhất giữa nguyên tử A₁ với các nguyên tử khác trong hợp kim ở 0 K và được xác định từ điều kiện cực tiểu của năng lượng liên kết u_{0A_1} . u_{0A} , γ_{1A} , γ_{2A} là các thông số của kim loại sạch A với cấu trúc lập phương đơn giản (SC) trong phép gần đúng 2 quả cầu phối vị [12].

$$u_{0A} = 3\varphi_{AA}(r_{1A}) + 6\varphi_{AA}(r_{2A}), r_{2A} = \sqrt{2}r_{1A}, u_{0A} = 3\varphi_{AA}(r_{1A}) + 6\varphi_{AA}(r_{2A}), r_{2A} = \sqrt{2}r_{1A}, \quad (14)$$

$$k_A = \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}^2} + \frac{2}{r_{1A}} \frac{d\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}} + 4 \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^2} + \frac{2}{r_{2A}} \frac{d\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{1A} = & \frac{1}{24} \frac{d^4\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}^4} + \frac{1}{4r_{1A}^2} \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}^2} - \frac{1}{4r_{1A}^3} \frac{d\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}} + \\ & + \frac{1}{6} \frac{d^4\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^4} + \frac{1}{4r_{2A}^2} \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^2} - \frac{1}{4r_{2A}^3} \frac{d\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{2A} = & \frac{1}{2a_{1A}} \frac{d^3\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}^3} - \frac{9}{8r_{1A}^2} \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}^2} + \frac{9}{8r_{1A}^3} \frac{d\varphi_{AA}(r_{1A})}{dr_{1A}} + \\ & + \frac{1}{12} \frac{d^4\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^4} + \frac{3}{2r_{2A}} \frac{d^3\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^3} - \frac{4}{r_{2A}^2} \frac{d^2\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}^2} + \frac{4}{r_{2A}^3} \frac{d\varphi_{AA}(r_{2A})}{dr_{2A}}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\gamma_A = 4(\gamma_{1A} + \gamma_{2A}). \quad (18)$$

2.4. Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa hai nguyên tử

Phương trình trạng thái của HKXK AB với cấu trúc LPTK ở nhiệt độ T và áp suất P có thể viết dưới dạng

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \theta_{xcthx} \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right), v = \frac{4(r_1)^3}{3\sqrt{3}}. \quad (19)$$

Tại $T = 0$ K, (19) trở thành

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \frac{h\omega_0}{4k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (20)$$

Nếu biết thế tương tác φ_{i0} , (20) cho phép xác định khoảng lân cận gần nhất $r_{1X}(P, 0)$ ($X = A, A_1, B$) tại áp suất P và nhiệt độ 0 K. Nếu biết $r_{1X}(P, 0)$ ta có thể xác định các thông số hợp kim $k_X(P, 0), \gamma_{1X}(P, 0), \gamma_{2X}(P, 0), \gamma_X(P, 0)$ tại áp suất P và nhiệt độ 0 K đối với mỗi trường hợp của X. Khi đó, ta có thể tìm được độ dời $y_{0X}(P, T)$ của nguyên tử X từ vị trí cân bằng tại áp suất P và nhiệt độ T . Từ đó, ta có thể tính khoảng lân cận gần nhất $r_{1X}(P, T)$ tại áp suất P và nhiệt độ T như sau:

$$r_{1B}(P, T) = r_{1B}(P, 0) + y_A(P, T), r_{1A}(P, T) = r_{1A}(P, 0) + y_A(P, T),$$

$$r_{1A}(P, T) = \frac{2\sqrt{3}}{3} r_{1B}(P, T). \quad (21)$$

Khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử A trong HKXK AB có cấu trúc B_2 có dạng

$$\overline{r_{1A}(P, T)} = \overline{r_{1A}(P, 0)} + \overline{y(P, T)},$$

$$\overline{r_{1A}}(P, 0) = (1 - c_B) r_{1A}(P, 0) + c_B r'_{1A}(P, 0), r'_{1A}(P, 0) = \frac{2\sqrt{3}}{3} r_{1B}(P, 0),$$

$$\overline{y(P, T)} = (1 - 9c_B) y_A(P, T) + c_B y_B(P, T) + 8c_B y_{A_1}(P, T), \quad (22)$$

trong đó $\overline{r_{1A}}(P, T)$ là khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử A trong HKXK AB tại áp suất P và nhiệt độ T , $\overline{r_{1A}}(P, 0)$ là khoảng lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử A trong HKXK AB tại áp suất P và nhiệt độ 0 K, $r_{1A}(P, 0)$ là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong kim loại sạch A tại áp suất P và nhiệt độ 0 K, $r'_{1A}(P, 0)$ là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong vùng chứa nguyên tử xen kẽ B tại áp suất P và nhiệt độ 0 K và c_B nồng độ nguyên tử xen kẽ B.

2.5. Hệ số nén đẳng nhiệt và môđun đàn hồi đẳng nhiệt

Hệ số nén đẳng nhiệt và môđun đàn hồi đẳng nhiệt của HKXK AB với cấu trúc B₂ là

$$\chi_{TAB} = \frac{3 \left(\frac{a_{AB}}{a_{0AB}} \right)^3}{2P + \frac{3\sqrt{3}}{4a_{AB}} \frac{1}{3N} \left(\frac{\partial^2 \psi_{AB}}{\partial a_{AB}^2} \right)_T}, B_{TAB} = \frac{1}{\chi_{TAB}}, \quad (23)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \psi_{AB}}{\partial a_{AB}^2} \right)_T \approx c_A \left(\frac{\partial^2 \psi_A}{\partial a_A^2} \right)_T + c_B \left(\frac{\partial^2 \psi_B}{\partial a_B^2} \right)_T + c_{A_1} \left(\frac{\partial^2 \psi_{A_1}}{\partial a_{A_1}^2} \right)_T, \quad (24)$$

$$\frac{1}{3N} \left(\frac{\partial^2 \psi_X}{\partial r_{1X}^2} \right)_T = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^2 U_{0X}}{\partial r_{1X}^2} \right)_T + \frac{h\omega_X}{4k_X} \left[\frac{\partial^2 k_X}{\partial r_{1X}^2} - \frac{1}{2k_X} \left(\frac{\partial k_X}{\partial r_{1X}} \right)^2 \right], X = A, B, A_1, \quad (25)$$

trong đó $c_A = 1 - 9c_B$, $c_{A_1} = 8c_B$ đối với HKXK có cấu trúc B₂.

2.6. Hệ số dẫn nở nhiệt

Hệ số dẫn nở nhiệt của hợp kim được cho bởi

$$\alpha_{TAB} = \frac{k_{Bo}}{a_{0AB}} \frac{da_{AB}}{d\theta} = -\frac{k_{Bo} \chi_{TAB}}{3} \left(\frac{a_{0AB}}{a_{AB}} \right)^2 \frac{a_{AB}}{v_{AB}} \frac{1}{3N} \frac{\partial^2 \psi_{AB}}{\partial \theta \partial a_{AB}}, \quad (26)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_{AB}}{\partial \theta \partial a_{AB}} \approx c_A \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \theta \partial a_A} + c_B \frac{\partial^2 \psi_B}{\partial \theta \partial a_B} + c_{A_1} \frac{\partial^2 \psi_{A_1}}{\partial \theta \partial a_{A_1}}, \quad (27)$$

$$\frac{1}{3N} \frac{\partial^2 \psi_X}{\partial \theta \partial a_X} = \frac{1}{2k_X} \frac{\partial k_X}{\partial a_X} Z_X^2 + \frac{2\theta}{k_X^2} \left[\frac{\gamma_{1X}}{3k_X} \frac{\partial k_X}{\partial a_X} (2 + Y_X Z_X^2) - \frac{1}{6} \frac{\partial \gamma_{1X}}{\partial a_X} (4 + Y_X + Z_X^2) - \left(\frac{2\gamma_{2X}}{k_X} \frac{\partial k_X}{\partial a_X} - \frac{\partial \gamma_{2X}}{\partial a_X} \right) Y_X Z_X^2 \right]. \quad (28)$$

2.7. Năng lượng

Năng lượng của hợp kim bằng

$$E_{AB} = \psi_{AB} - \theta \frac{\partial \psi_{AB}}{\partial \theta} \approx c_A E_A + c_B E_B + c_{A_1} E_{A_1}, \quad (29)$$

$$E_X = U_{0X} + E_{0X} + \frac{3N\theta^2}{k_X^2} \left[\gamma_{2X} Y_X^2 + \frac{\gamma_{1X}}{3} (2 + Z_X^2) - 2\gamma_{2X} Y_X Z_X^2 \right], E_{0X} = 3N\theta Y_X. \quad (30)$$

2.8. Entropi

Entropi của hợp kim được xác định bởi

$$S_{AB} = \frac{E_{AB} - \psi_{AB}}{T} \approx c_A S_A + c_B S_B + c_{A_1} S_{A_1}, \quad (31)$$

$$S_X = S_{0X} + \frac{3Nk_{Bo}\theta}{k_X^2} \left[\frac{\gamma_{1X}}{3} (4 + Y_X + Z_X^2) - 2\gamma_{2X} Y_X Z_X^2 \right], S_{0X} = 3Nk_{Bo}\theta [Y_X - \ln(2 \sinh x_X)], \quad (32)$$

2.9. Nhiệt dung đẳng tích

Nhiệt dung đẳng tích của hợp kim tìm được từ biểu thức sau

$$C_{VAB} = \frac{\partial E_{AB}}{\partial T} \approx c_A C_{VA} + c_B C_{VB} + c_{A_1} C_{VA_1}, \quad (33)$$

$$C_{VX} = 3Nk_{Bo} \left\{ Z_X^2 + \frac{2\theta}{k_X^2} \left(2\gamma_{2X} + \frac{\gamma_{1X}}{3} \right) Y_X Z_X^2 + \frac{\gamma_{1X}}{3} (1 + Z_X^2) - \gamma_{2X} (Z_X^4 + Y_X^2 Z_X^2) \right\}. \quad (34)$$

2.10. Nhiệt dung đẳng áp

Nhiệt dung đẳng tích của hợp kim được cho bởi

$$C_{PAB} = C_{VAB} + \frac{9TV_{AB}\alpha_{TAB}^2}{\chi_{TAB}}. \quad (35)$$

2.11. Hệ số nén đoạn nhiệt và môđun đàn hồi đoạn nhiệt

$$\chi_{SAB} = \frac{C_{VAB}}{C_{PAB}} \chi_{TAB}, B_{SAB} = \frac{1}{\chi_{SAB}}. \quad (36)$$

2.12. Thông số Gruneisen

$$\gamma_{GAB} = \frac{3\alpha_{TAB} V_{AB}}{\chi_{TAB} C_{VAB}}. \quad (37)$$

3. Kết luận

Bằng PPTKMM, chúng tôi lần đầu tiên đã rút ra biểu thức giải tích của năng lượng tự do Helmholtz, năng lượng liên kết, các thông số hợp kim, khoảng lân cận gần nhất trung bình và các đại lượng nhiệt động như hệ số dẫn nở nhiệt, các hệ số nén đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, các môđun đàn hồi đẳng nhiệt và đoạn nhiệt, năng lượng, entropi, các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp, thông số Gruneisen đối với HKXK AB với cấu trúc B₂ phụ thuộc vào nhiệt độ, áp suất và nồng độ nguyên tử xen kẽ. Trong trường hợp giới hạn khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, chúng tôi thu được lý thuyết nhiệt động của kim loại chính A.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K.M.Zhao, G.Jiang and L.Wang, 2011. Electronic and thermodynamic properties of B₂-FeSi from first principles. *Physica*, **B406**, pp.363-357.

- [2] W. F. Smith, 1993. *Structure and properties of engineering alloys*. McGraw-Hill, Inc.
- [3] S. L. Chaplot, R. Mittal and N. Choudhury, 2010. *Thermodynamic properties of solids: experiment and modeling*. Wiley-VCH Verlag GmBh & Co.KgaA.
- [4] Y. Fukai, 1993. *The metal-hydrogen system*. Springer. Berlin.
- [5] T. T. Lau, C. J. Först, X. Lin, J. D. Gale, S. Yip, and K. J. Van Vliet, 2007. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, p.215501.
- [6] L. S. I. Liyanage, S-G. Kim, J. Houze, S. Kim, M. A. Tschoop, M. I. Baskes and M. F. Horstemeyer, 2014. Structural. elastic and thermal properties of cementite (Fe₃C) calculated using a modified embedded atom method. *Phys. Rev.*, **B89**, p.094102.
- [7] D. P. Dobson, L. Vocadlo and I. G. Wood, 2002. A new high-pressure of FeSi. *American mineralogist*, **87**, 5-6,784-787.
- [8] D. P. Dobson, W. A. Crichton, P. Bouvier, L. Vocadlo and I. G. Wood, 2003. The equation of state of CsCl-structured FeSi to 40 GPa: Implications for silicon in the Earth's core. *Geophysical Research Letters*, **30**, 1, 1014.
- [9] S. Ono, T. Kikegawa and Y. Ohishi, 2007. Equation of state of the high-pressure polymorph of FeSi to 67 GPa. *European Journal of Mineral*, **19**, 183-187.
- [10] R. Caracas and R. Wentzcovitch, 2004. Equation of state and elasticity of FeSi. *Geophysical Research Letters*, **31**, L20603.
- [11] L.Vocadlo, G. D. Price and I. G. Wood, 1999. Crystal structure, compressibility and possible phase transitions in FeSi studied by first-principles pseudopotential calculation. *Acta Crystallographia. Section B. Structural Science*, **55**, 484.
- [12] Vũ Văn Hùng, 2009. *Phương pháp thống kê mômen trong nghiên cứu tính chất nhiệt động và đàn hồi của tinh thể*. NXB Đại học Sư phạm, Hà Nội.
- [13] Nguyen Quang Hoc, Dinh Quang Vinh, Bui Duc Tinh, Tran Thi Cam Loan, Ngo Lien Phuong, Tang Thi Hue and Dinh Thi Thanh Thuy, 2015. Thermodynamic properties of binary interstitial alloys with a BCC structure: dependence on temperature and concentration of interstitial atoms. *Journal of Science of HNUE*, Math. and Phys. Sci. Vol. 60, Issue 7, pp.146-155.
- [14] Nguyen Quang Hoc, Nguyen Thi Hoa and Nguyen Duc Hien, 2019. Build the theory of nonlinear deformation for BCC and FCC substitutional alloys AB with interstitial atom C under pressure. *Journal of Science of HNUE*, Natural Sci, Vol. 64, Issue 6, pp.45-56.

ABSTRACT

Thermodynamic theory for interstitial alloy AB with B₂ structure

Nguyen Quang Hoc, Nguyen Thien Thanh, Nguyen Nhat Hoang, Chu Minh Thu
and Nguyen Thi Thao Linh

Faculty of Physics, Hanoi National University of Education

The analytic expressions of the Helmholtz free energy, the cohesive energy, alloy parameters, mean nearest neighbor distance and thermodynamic quantities such as the thermal expansion coefficient, the isothermal and adiabatic compressibilities, the isothermal and adiabatic elastic modulus, the energy, the entropy, the heat capacities at constant-volume and at constant-pressure, the Gruneisen parameter for interstitial alloy AB with the B₂ structure under pressure are derived using the statistical moment method. In limit cases when the concentration of interstitial atoms is equal to zero, the thermodynamic theory is appropriate for the main metal A.

Keywords: B₂ structure, interstitial alloys, alloy parameter, mean nearest neighbor distance, statistical moment method.