Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2025

DREAM http://dream-iournal.org

http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

Received: 19.04.2025 **Revised:** 19.06.2025 **Accepted:** 27.06.2025

DOI: 10.17804/2410-9908.2025.3.006-015

ON THE ABNORMAL BEHAVIOR OF COMPRESSIBILITY IN THE Fe₇₂Pt₂₈ INVAR ALLOY

E. Z. Valiev^{1, a, *} and V. I. Bobrovskii^{1, b}

¹M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russia

*Corresponding author. Email: valiev@imp.uran.ru Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620218, Russia Phone/fax: +7 (343) 374-0003

In the paper, we apply our previously developed phenomenological theory of magnetoelastic interaction to a systematic description of the behavior of the elastic and magnetic characteristics of invars under pressure. This approach allows us to explain a seemingly paradoxical decrease in the compression moduli of the Fe₇₂Pt₂₈ invar under pressure alongside the simultaneously observed *standard* increase in the shear moduli. This paradox of compressibility in invar alloys proves to be due to two factors, namely the existence of a minimum of the compression modulus near the Curie point and the pressure-induced shift of the Curie point. Note that, in addition to a qualitative explanation of the unusual behavior of compressibility in invars, our formulas provide a good quantitative agreement with experiment. Our conclusions are supported by numerical calculations performed with the use of formulas based on the Heisenberg model with allowance made for magnetoelastic interaction.

Keywords: invar alloys, compression moduli, shear moduli, magnetoelastic interaction, phenomenological theory, Curie point, Heisenberg model

Acknowledgment

The research was carried out at the IMP Neutron Material Science Complex under the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation for the IMP UB RAS.

References

- 1. Lohaus, S.H., Heine, M., Guzman, P., Bernal-Choban, C.M., Saunders, C.N., Shen, G., Hellman, O., Broido, D., and Fultz, B. A thermodynamic explanation of the Invar effect. *Nature Physics*, 2023, 19, 1642–1648. DOI: 10.1038/s41567-023-02142-z.
- 2. Ehn, A., Alling, B., and Abrikosov, I.A. First-principles theory of the pressure-induced Invar effect in FeNi alloys. *Physical Review B*, 2023, 107, 104422. DOI: 10.1103/PhysRevB.107.104422.
- 3. Ruban, A.V. First-principles modeling of the Invar effect in Fe₆₅Ni₃₅ by the spin-wave method. *Physical Review B*, 2017, 95, 174432. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.174432.
- 4. Manosa, L., Saunders, G.A., Rahdi, H., Kawald, U., Pelzl, J., and Bach, H. Longitudinal acoustic mode softening and Invar behaviour in Fe₇₂Pt₂₈. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1991, 3 (14), 14, 2273–2278. DOI: 10.1088/0953-8984/3/14/006.

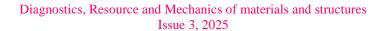
Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures Issue 3, 2025



http://dream-journal.org

ISSN 2410-9908

- 5. Manosa, L., Saunders, G.A., Rahdi, H., Kawald, U., Pelzl, J., and Bach, H. Acoustic-mode vibrational anharmonicity related to the anomalous thermal expansion of Invar iron alloys. *Physical Review B*, 1992, 45, 2224–2236. DOI: 10.1103/PhysRevB.45.2224.
- 6. Kim, D.J. Electron-phonon interaction mechanism of magnetovolume and magnetoelasticity effects in itinerant electron ferromagnets. *Physical Review B*, 1989, 39 (10), 6844–6856. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.6844.
- 7. Wagner, D.V., Zverev, M., Silin, V.P., and Tkhon, M. Baric anomaly in the bulk modulus of the Invar-like alloy Fe₇₂Pt₂₈. *JETP Letters*, 1992, 56 (11), 595–598.
- 8. Valiyev, É.Z. Phenomenological theory of magnetoelastic interactions in Invars and Elinvars. *Soviet Physics Uspekhi*, 1991, 34 (8), 685–704. DOI: 10.1070/PU1991v034n08ABEH002463.
- 9. Valiev, E.Z. *Problema invara. Termodinamicheskaya teoriya i analiz* [The Invar Problem. Thermodynamic Theory and Analysis]. Palmarium Academic Publishing, 2017, 192 p. (In Russian).
- 10. Sirotin, Yu.I. and Shaskolskaya, I.P. *Osnovy kristallofiziki* [Fundamentals of Crystal Physics]. Nauka Publ., Moscow, 1979, 640 p. (In Russian).
- 11. Valiev, E.Z. and Bobrovskii, V.I. Spontaneous volume magnetostriction in antiferromagnets and its manifestation in an FeRh alloy. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2024, 5, 170–180. DOI: 10.17804/2410-9908.2024.5.170-180. Available at: http://dream-journal.org/issues/2024-5/2024-5_472.html
- 12. Valiev, E.Z. and Menshikov, A.Z. Linear and nonlinear magnetoelastic interactions in the molecular field theory and invar anomalies. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1984, 46 (1–2), 199–206. DOI: 10.1016/0304-8853(84)90357-3.
- 13. Valiev, E.Z. and Kazantsev, V.A. Magnetocaloric effect in La(Fe $_x$ Si $_{1-x}$) $_{13}$ ferromagnets. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2011, 113 (6), 1000–1005. DOI: 10.1134/S1063776111150118.





ISSN 2410-9908

Подана в журнал: 19.04.2025

УДК 669.018.58.017

DOI: 10.17804/2410-9908.2025.3.006-015

К АНОМАЛЬНОМУ ПОВЕДЕНИЮ СЖИМАЕМОСТИ В ИНВАРНОМ СПЛАВЕ Fe₇₂Pt₂₈

Э. 3. Валиев ^{1, а, *}, В. И. Бобровский ^{1, б}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620137, Россия

*Ответственный автор. Электронная почта: valiev@imp.uran.ru Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, д. 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия Тел./факс: +7 (343) 374-00-03

В данной работе мы использовали развитую нами ранее феноменологическую теорию магнитоупругого взаимодействия для систематического описания поведения упругих и магнитных характеристик инваров под давлением. Это позволило нам объяснить кажущееся парадоксальным уменьшение модулей сжатия в инваре $Fe_{72}Pt_{28}$ под давлением на фоне одновременно наблюдаемого «стандартного» увеличения модулей сдвига. Данный парадокс сжимаемости в инварных сплавах оказался обусловлен двумя факторами: существованием минимума модуля сжатия в окрестности точки Кюри и смещением точки Кюри под давлением. Отметим, что наши формулы дают не только качественное объяснение необычного поведения сжимаемости в инварах, но и неплохое количественное совпадение с экспериментом. Наши выводы также подтверждены численными расчетами, выполненными нами с использованием формул, основанных на модели Γ ейзенберга с учетом магнитоупругого взаимодействия.

Ключевые слова: инварные сплавы, модули сжатия, модули сдвига, магнитоупругое взаимодействие, феноменологическая теория, точка Кюри, модель Гейзенберга

1. Введение

Несмотря на то что первые инварные сплавы открыты достаточно давно и к настоящему времени представители этого семейства материалов широко применяются в различных областях техники, сохраняется высокий интерес к изучению их свойств и механизмов взаимодействий решеточной и магнитной подсистем, которыми они обусловлены [1, 2, 3]. При этом можно отметить, что, хотя некоторые из проблем, касающихся данного класса материалов, известны уже продолжительное время, они все еще ждут своего решения.

При исследовании зависимости скорости звука от давления в инварных сплавах $Fe_{65}Ni_{35}$ и $Fe_{72}Pt_{28}$ было обнаружено необычное поведение упругих постоянных [4, 5]. Оказалось, что объемный модуль упругости и упругие постоянные, ответственные за распространение продольных звуковых волн, уменьшаются при увеличении давления, т. е. сжимаемость среды растет, в то время как обычно сжимаемость материалов при увеличении давления уменьшается. Для объяснения данного аномального поведения привлекались идеи учета влияния фононной системы на магнитные свойства ферромагнетиков и эффекты магнитоупругости [6, 7]. Однако формул, описывающих зависимость упругих констант от давления, при этом получено не было, и, соответственно, подробные расчеты эффекта отсутствуют.

ISSN 2410-9908

Основным результатом работ [4, 5] является установление факта ([4], табл. 1), что упругие постоянные C_{11} и C_{12} , а также модуль сжатия $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ имеют отрицательный знак производной по давлению при температурах ниже точки Кюри. При этом знак производных по давлению для модулей сдвига C_{44} и $\frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$ остается положительным. Выше температуры Кюри все эти производные ведут себя обычным образом.

В настоящей работе мы покажем, что обнаруженный в работах [4, 5] эффект может быть удовлетворительно количественно объяснен с помощью феноменологической теории магнитоупругого взаимодействия в инварах, предложенной в работах [8, 9].

2. Постановка задачи и методы решения

Согласно феноменологической теории магнитоупругого взаимодействия (МУВ), выражения для упругих постоянных ферромагнетика при постоянных магнитном поле H и намагниченности M могут быть представлены в следующем виде [8, 9]:

$$C_{iklm}^H = C_{iklm}^M - 4M^2 \chi_V \Gamma_{ik} \Gamma_{lm} \; ; \; C_{iklm}^M = C_{iklm}^0 + \varepsilon_{iklm} M^2. \tag{1}$$

Здесь C^0_{iklm} — затравочные упругие постоянные (без учета МУВ); Γ_{ik} и ϵ_{iklm} — постоянные МУВ первого и второго порядка соответственно; $\chi_V = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_V$ — магнитная восприимчивость при постоянном объеме.

Величины диагональных элементов скалярной матрицы $\Gamma_{ik} = \gamma \delta_{ik}$ задаются переменной γ , определяющей значение относительной спонтанной объемной магнитострикции, связывая относительное изменение объема модулем сжатия при постоянном значении намагниченности M, $\omega = \Delta V/V$ с B^M , по формуле

$$\omega = -\gamma M^2 (B^M)^{-1}. \tag{2}$$

Из формулы (1) следуют равенства для основных упругих постоянных кубического ферромагнетика:

$$\begin{cases} C_{1111}^{H} = C_{1111}^{M} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \Rightarrow C_{11}^{H} = C_{11}^{M} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \\ C_{11}^{M} = C_{11}^{0} + \varepsilon_{11}M^{2} \\ C_{1122}^{H} = C_{1122}^{M} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \Rightarrow C_{12}^{H} = C_{12}^{M} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2}. \\ C_{12}^{M} = C_{12}^{0} + \varepsilon_{12}M^{2} \\ C_{1212}^{H} = C_{1212}^{M} = C_{44}^{0} + \varepsilon_{44}M^{2} \end{cases}$$

$$(3)$$

В формулах системы (3) совершен общеупотребительный переход от четырехиндексного обозначения для упругих постоянных C^0_{iklm} и постоянных МУВ ε_{iklm} кубического кристалла к двухиндексному их обозначению C^0_{ik} и ε_{ik} [10]. Тогда для модулей сжатия $B^{H,M}=\frac{1}{3}\left(C^{H,M}_{11}+2C^{H,M}_{12}\right)$ и модулей сдвига кубического кристалла $\frac{1}{2}\left(C^{H,M}_{11}-C^{H,M}_{12}\right)$ и $C^{H,M}_{44}$ окончательно получаем:

$$\begin{cases} B^{H} = B^{M} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \\ B^{M} = B^{0} + \frac{1}{3}\{\varepsilon_{11} + 2\varepsilon_{12}\}M^{2} \\ B^{0} = \frac{1}{3}\{C_{11}^{0} + 2C_{12}^{0}\} \\ \frac{1}{2}\{C_{11}^{H} - C_{12}^{H}\} = \frac{1}{2}\{C_{11}^{M} - C_{12}^{M}\} = C' \\ C_{44}^{H} = C_{44}^{M} = C_{44}^{0} + \varepsilon_{44}M^{2} = C_{44} \end{cases}$$

$$(4)$$

Valiev E. Z. and Bobrovskii V. I. On the abnormal behavior of compressibility in the $Fe_{72}Pt_{28}$ invar alloy // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2025. – Iss. 3. – P. 006–015. – DOI: 10.17804/2410-9908.2025.3.006-015.



ISSN 2410-9908

Таким образом, из систем (3) и (4) видно, что отличия имеются внутри пар C_{11}^H и C_{11}^M , C_{12}^H и C_{12}^M , B^H и B^M , а модули сдвига C' и C_{44} при постоянных M и H совпадают. Это следствие учета в вышеприведенных выражениях лишь чисто объемных самопроизвольных магнито-упругих деформаций, которые велики и доминируют в инварах. Отметим здесь же, что равновесными значениями упругих постоянных являются их значения при постоянном магнитном поле H. Значения этих постоянных при M = const можно измерить в экспериментах по рассеянию нейтронов [8, 9].

Формулы для равновесных значений упругих констант C_{11}^H , C_{12}^H и B^H легко преобразуются к следующему виду:

$$\begin{cases} C_{11}^{H} = C_{11}^{0} + \varepsilon_{11}M^{2} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \\ C_{12}^{H} = C_{12}^{0} + \varepsilon_{12}M^{2} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \\ B^{H} = B^{0} + \frac{1}{3}(\varepsilon_{11} + 2\varepsilon_{12})M^{2} - 4M^{2}\chi_{V}\gamma^{2} \end{cases}$$
(5)

Вычисляя производные по давлению P от упругих констант в (5), получаем:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_{11}^H}{\partial P} = \frac{\partial c_{11}^M}{\partial P} - 8\chi_V \gamma^2 M \frac{\partial M}{\partial P} - 4M^2 \gamma^2 \frac{\partial \chi_V}{\partial P} \\ \frac{\partial c_{11}^M}{\partial P} = \frac{\partial c_{11}^0}{\partial P} + 2M \varepsilon_{11} \frac{\partial M}{\partial P} \end{cases}, \tag{6}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial C'}{\partial P} = \frac{\partial C'^{0}}{\partial P} + M(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{12}) \frac{\partial M}{\partial P} \\ \frac{\partial C_{44}}{\partial P} = \frac{\partial C_{44}^{0}}{\partial P} + 2M\varepsilon_{44} \frac{\partial M}{\partial P} \end{cases}$$
(7)

3. Результаты и обсуждение

Обратимся теперь к имеющимся экспериментальным данным. Намагниченность инваров, как известно, уменьшается с ростом давления, т. е. выполняется неравенство $\partial M/\partial P < 0$. В работах [8, 9] были определены численные значения постоянных магнитоупругого взаимодействия. Для железо-платинового инвара $Fe_{72}Pt_{28}$ они оказались следующими:

$$\gamma = -1.3 \cdot 10^4; \ \epsilon_{11} \approx -7 \cdot 10^4; \ \epsilon_{12} = 1.9 \cdot 10^5; \ \epsilon_{44} \approx -10^5; \ (\epsilon_{11} - \epsilon_{12}) \approx -2.6 \cdot 10^5. \tag{8}$$

Отметим, что все величины в (8) безразмерные.

Так как упругие постоянные обычно увеличиваются с ростом давления, то будем считать, что производные всех «затравочных» (т. е. отмеченных верхним индексом «0») постоянных положительны, например, $\partial C_{11}^0/\partial P \geq 0$ и т. д. С учетом знаков констант в (8) и отрицательности производной $\partial M/\partial P$ из системы (7) следует, что производные $\partial C_{44}/\partial P$ и $\partial C'/\partial P$ имеют положительный знак. Этот факт полностью соответствует экспериментальным данным (табл. 1 работы [4]).

Из выражений (3)–(5) видно, что, в отличие от сдвиговых упругих констант C' и C_{44} , упругие постоянные C_{11} , C_{12} и B содержат слагаемое $4M^2\chi_V\gamma^2$, которое в основном и определяет их температурную зависимость и зависимость от давления.

Из экспериментальных данных авторов работ [4, 5] следует, что производные величин C_{11} , C_{12} и B по давлению имеют отрицательный знак и бо́льшую абсолютную величину, чем производные от C' и C_{44} . Как мы видим, такое различие в зависимостях модулей сдвига и объемного сжатия от температуры и давления в инварном сплаве $Fe_{72}Pt_{28}$ вполне согласуется с формулами (3)–(7).

ISSN 2410-9908

Наши выводы можно также подтвердить численными расчетами с использованием формул, основанных на модели Гейзенберга с учетом магнитоупругого взаимодействия, предложенных в работах [8, 9, 11].

Согласно исследованиям [8, 9, 12, 13], зависимость приведенной намагниченности m от температуры и давления определяется системой

$$\begin{cases}
m = \frac{M(T)}{M(0)} = B_s(x) \\
x = \frac{2\mu s H + 2s^2 Jm}{kT}
\end{cases} ,$$
(9)

где $B_s(x)$ — функция Бриллюэна для спина s; μ — магнетон Бора; k — постоянная Больцмана; J — обменный интеграл.

Выражение для аргумента функции Бриллюэна x получается при учете зависимости обменного интеграла от объема в виде [8, 9, 13]

$$J = J^0 + \gamma' \omega + \varepsilon' \omega^2 / 6. \tag{10}$$

Фигурирующие здесь постоянные МУВ γ' и ϵ' связаны с вводившимися ранее параметрами γ и ϵ соотношениями:

$$\gamma' = -4\mu^2 n\gamma; \ \epsilon' = -4\mu^2 n\epsilon, \tag{11}$$

где n — число атомов в единице объема; $\varepsilon' = \varepsilon'_{11} + 2 \varepsilon'_{12}$.

Объемный модуль сжатия при постоянной намагниченности выражается формулой

$$B^{m} = B^{0} - \frac{1}{3}ns^{2}\varepsilon'm^{2}.$$
 (12)

Равновесные значения относительной объемной деформации ω, модуля сжатия B^m , обменного интеграла J^0 и аргумента x, как это следует из формул (9)–(12), равны

$$\begin{cases}
\omega = (n\gamma' s^2 m^2 - P)(B^m)^{-1} \\
B^m = B^0 - ns^2 \varepsilon' m^2 / 3 , \\
I^0 = 3kT_c^0 / 2s(s+1)
\end{cases} \tag{13}$$

$$x = \left\{ m[3s(s+1)^{-1}kT_c^0 + (2n(\gamma')^2s^4m^2 - 2s^2\gamma'P)(B^m)^{-1}] + 2\mu sH \right\}/kT.$$
 (14)

Здесь T_c^0 – температура Кюри без учета МУВ (т. е. при γ' , $\epsilon' = 0$). Для дальнейших расчетов мы принимаем значения констант МУВ равными:

$$\gamma' \cong 3.6 \cdot 10^{-20} \, \text{Дж}; \quad \epsilon' \cong -8.4 \cdot 10^{-19} \, \text{Дж},$$
 (15)

что в z=12 раз больше значений, использованных при расчетах в работе [12], поскольку там обменный интеграл представлял взаимодействие между одиночными атомами в приближении ближайших z соседей, а у нас выделенный атом взаимодействует со всеми атомами образца.

Используя формулы (9) и (14) и учитывая [13], можно получить выражение для объемного модуля сжатия B^H и магнитной восприимчивости при постоянном объеме χ :

$$B^{H} = -(\partial \omega / \partial P)_{T,H}^{-1} = B^{m} - 2s^{2}m^{2} \left(\gamma' + \frac{\varepsilon'\omega}{3} \right)^{2} n\chi/\mu, \tag{16}$$



ISSN 2410-9908

$$\chi = (\partial m/\partial H)_V = 2\mu s B_s'(x) m/[kTm - (kTx - 2\mu s H)B_s'(x)]. \tag{17}$$

Здесь $B_s'(x)$ – производная функции Бриллюэна.

Магнитная восприимчивость \square отличается от χ_V из формул (1)–(6) множителем M:

$$\chi_V = M\chi; M = 2s\mu n.$$

Исходя из формул (9), (14), зависимость температуры Кюри от давления P можно представить в удобной для практических расчетов форме:

$$T_c = T_c^0 - \frac{4P}{3kB^0} \left(\gamma' + \frac{\varepsilon'P}{3B^0} \right). \tag{18}$$

На рис. 1 показан результат расчета температурной зависимости модуля сжатия B^H для сплава $Fe_{72}Pt_{28}$, выполненного по формулам (9), (13)–(17). При этом были приняты следующие численные значения физических величин: γ' и ε' взяты из выражений (11), $T_c^0 = 380 \text{ K}$, $B^0 = 1,6 \cdot 10^{11} \text{ Па}$, $n = 7,6 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$, s = 1 [12]. На рисунке величина давления указана в широко используемых в таких измерениях гигапаскалях (1 $\Gamma\Pi = 10^9 \Pi = 10 \text{ кбар}$).

Как следует из результатов расчета, модуль сжатия имеет глубокий минимум в окрестности T_c , что подтверждается и экспериментальными данными, приведенными в работах [8] и [12]. Качественное объяснение такой зависимости можно усмотреть из формулы для ω в системе (13), согласно которой относительное изменение объема в инварных сплавах состоит из двух частей, одна из которых (второе слагаемое в системе (13) и первое слагаемое в формуле (16)) описывает сопротивление изменению объема от внешних деформаций. Это в основном решеточный вклад, и он слабо зависит от температуры. Первое слагаемое в системе (13) есть спонтанная объемная магнитострикция, а ее вклад в модуль сжатия дает второе слагаемое в формуле (16). Это слагаемое пропорционально магнитной восприимчивости и максимально в точке Кюри. Оно имеет отрицательный знак, так как все его сомножители положительны. Достаточно большое абсолютное значение магнитного вклада в модуль сжатия для инваров обусловлено значительной величиной их спонтанной объемной магнитострикции $\omega \sim 10^{-2}$.

Температура Кюри сплава $Fe_{72}Pt_{28}$ зависит от давления. Расчет по формуле (18) для P=1 ГПа дает значение $T_C=357$ К. На рис. 1 показана температурная зависимость модуля сжатия B^H при давлении 1 ГПа. Видно, что в интервале температур 150–350 К модуль сжатия уменьшается. Этот факт объясняет в инварном сплаве $Fe_{72}Pt_{28}$ аномальную зависимость (парадокс) сжимаемости (ее рост) при приложении давления.

Таким образом, парадокс сжимаемости в инварных сплавах под давлением обусловлен двумя факторами: существованием минимума модуля сжатия (максимума сжимаемости) в окрестности точки Кюри и смещением точки Кюри в область низких температур. Оба этих факта хорошо понятны с точки зрения феноменологической теории магнитоупругого взаимодействия [8, 9, 12].

Отметим, что кроме качественного объяснения необычного поведения сжимаемости в инварах наши формулы дают и неплохое количественное совпадение с экспериментом.

ISSN 2410-9908

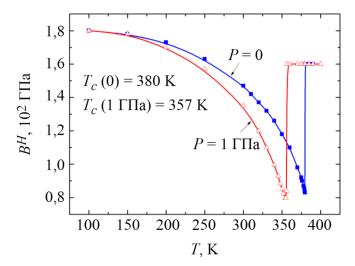


Рис. 1. Расчет температурной зависимости модуля объемного сжатия инварного сплава Fe₇₂Pt₂₈ от приложенного давления

На рис. 2 отображены результаты расчета температурной зависимости разности значений модуля объемного сжатия $\Delta B = B^H(P) - B^H(0)$. Эта разность имеет отрицательный знак, глубокий минимум в окрестности $T_{\rm C}$ и разрыв (скачок) в точке Кюри. Поделив эту разность на приращение аргумента $\Delta P = 1$ ГПа, получаем температурную зависимость производной $\partial B^H/\partial P$, которую можно сравнить с экспериментальными данными, представленными в работах [4, 5].

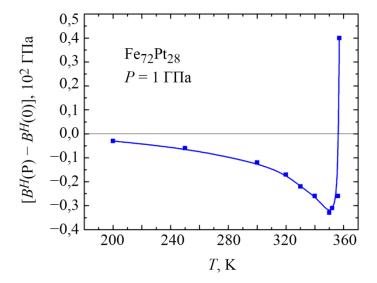


Рис. 2. Температурная зависимость разности модулей объемного сжатия $Fe_{72}Pt_{28}$, рассчитанных при давлениях P=1 ГПа и P=0

С использованием вышеприведенных формул можно также рассчитать производную $\partial C'/\partial P$. Как следует из системы (7),

$$\frac{\partial C'}{\partial P} = \frac{\partial C'^0}{\partial P} + M(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{12}) \frac{\partial M}{\partial P},\tag{19}$$

где $M = 2s\mu nm$, а $(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{12}) = -2.6 \cdot 10^{-2} \text{ H/A}^2$.

ISSN 2410-9908

Вычисляя с использованием формул (9) и (14) температурную зависимость M при различных значениях давления, можно определить значения производной $\partial C'/\partial P$. Она имеет положительный знак, так как $\partial M/\partial P < 0$. (Следует помнить, что $\partial C^0/\partial P \approx 0$).

На рис. 3 показаны экспериментально измеренные [4, 5] и рассчитанные по нашим формулам значения производных по давлению для модулей упругости сплава Fe₇₂Pt₂₈.

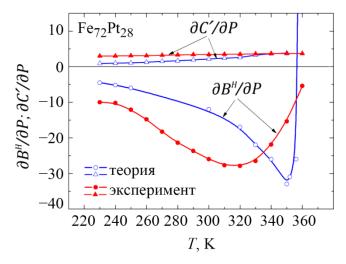


Рис. 3. Производные по давлению от модуля сжатия $\partial B^H/\partial P$ (кружки) и модуля сдвига $\partial C'/\partial P$ (треугольники) в зависимости от температуры: открытые символы — расчет по формулам (16), (17), (19); сплошные символы — эксперимент из [4, 5]

Этот рисунок демонстрирует полное качественное и удовлетворительное количественное согласие результатов экспериментов и расчетов. Отметим, что приблизительно такую же температурную зависимость, как C', имеет и производная модуля сдвига C'_{44} .

Добавим, что температурная зависимость сжимаемости, аналогичная изображенной на рис. 1, предсказана нами и для сплава La (Fe_xSi_{1-x}) в работе [13]. Таким образом, и в этом сплаве должно наблюдаться аномальное поведение сжимаемости под давлением.

4. Заключение

Феноменологическая теория магнитоупругого взаимодействия в инварах и элинварах, предложенная в работах [8, 9], позволяет понять и объяснить не только температурную зависимость большого числа термодинамических характеристик инварных сплавов. Эта теория удовлетворительно объясняет и аномальную зависимость от давления и температуры сдвиговых и объемных модулей упругости инваров. В отличие от качественного объяснения необычного поведения сжимаемости под давлением для инварного сплава Fe₇₂Pt₂₈, данного в работах [5, 6, 7], в нашей работе представлены явные формулы для расчета модулей упругости и показано удовлетворительное согласие расчетов с экспериментом. При этом требовавшиеся для расчета (в силу феноменологического характера предложенной теории) величины констант магнитоупругого взаимодействия брались из независимых результатов экспериментов [8, 9].

Полученные в данной работе результаты убедительно решают проблему парадокса сжимаемости, проявляющегося в инварных сплавах.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН. Результаты исследований частично получены с использованием УНУ «Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ».



ISSN 2410-9908

Литература

- 1 A thermodynamic explanation of the Invar effect / S. H. Lohaus, M. Heine, P. Guzman, C. M. Bernal-Choban, C. N. Saunders, G. Shen, O. Hellman, D. Broido, B. Fultz // Nature Physics. 2023. Vol. 19. P. 1642–1648. DOI: 10.1038/s41567-023-02142-z.
- 2 Ehn A., Alling B., Abrikosov I. A. First-principles theory of the pressure-induced invar effect in FeNi alloys // Physical Review B. 2023. Vol. 107. P. 104422. DOI: 10.1103/PhysRevB.107.104422.
- 3 Ruban A. V. First-principles modeling of the Invar effect in $Fe_{65}Ni_{35}$ by the spin-wave method // Physical Review B. 2017. Vol. 95. P. 174432. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.174432.
- 4 Longitudinal acoustic mode softening and Invar behaviour in $Fe_{72}Pt_{28}$ / L. Manosa, G. A. Saunders, H. Rahdi, U. Kawald, J. Pelzl, H. Bach // Journal of Physics: Condensed Matter. 1991. –Vol. 3 (14). P. 2273–2278. DOI: 10.1088/0953-8984/3/14/006.
- 5 Acoustic-mode vibrational anharmonicity related to the anomalous thermal expansion of Invar iron alloys / L. Manosa, G. A Saunders., H. Rahdi, U. Kawald, J. Pelzl, H. Bach // Physical Review B. 1992. Vol. 45. P. 2224–2236. DOI: 10.1103/PhysRevB.45.2224.
- Kim D. J. Electron-phonon interaction mechanism of magnetovolume and magnetoelasticity effects in itinerant electron ferromagnets // Physical Review B. 1989. Vol. 39 (10). P. 6844–6856. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.6844.
- Baric anomaly in the bulk modulus of the Invar-like alloy $Fe_{72}Pt_{28}$ / D. Wagner, V. M. Zverev, V. P. Silin, M. Tkhon // JETP Letters. -1992. Vol. 56 (11). P. 595–598.
- 8 Valiyev É. Z. Phenomenological theory of magnetoelastic interactions in Invars and Elinvars // Soviet Physics Uspekhi. 1991. Vol. 34 (8). P. 685–704. DOI: 10.1070/PU1991v034n08ABEH002463.
- 9 Валиев Э. 3. Проблема инвара. Термодинамическая теория и анализ. Palmarium Academic Publishing, 2017. 192 р.
- 10 Сиротин Ю. И., Шаскольская И. П. Основы кристаллофизики. 2-е изд, перераб. М : Наука, 1979.-641 с.
- Valiev E. Z., Bobrovskii V. I. Spontaneous volume magnetostriction in antiferromagnets and its manifestation in an FeRh alloy // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. 2024. Iss. 5. P. 170–180. DOI: 10.17804/2410-9908.2024.5.170-180. URL: http://dream-journal.org/issues/2024-5/2024-5_472.html
- Valiev E. Z., Menshikov A. Z. Linear and nonlinear magnetoelastic interactions in the molecular field theory and invar anomalies // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1984. Vol. 46 (1–2). P. 199–206. DOI: 10.1016/0304-8853(84)90357-3.
- 13. Valiev E. Z., Kazantsev V. A. Magnetocaloric effect in La(Fe $_x$ Si $_{1-x}$) $_{13}$ ferromagnets // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2011. Vol. 113 (6). P. 1000–1005. DOI: 10.1134/S1063776111150118.