

Н. А. Беляков, Б. Е. Винтайкин

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭНЕРГИИ  
УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ  
КОГЕРЕНТНО СОПРЯЖЕННЫХ ФАЗ  
НА ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ В СПЛАВАХ  
НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ Fe–Cr–Co МЕТОДАМИ  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

*Предложена модель равновесной структуры магнитных сплавов на основе системы Fe–Cr–Co, которая представляет собой сильно вытянутые по направлению [001] выделения ферромагнитной фазы  $\alpha_1$ , изолированные прослойками парамагнитной матрицы  $\alpha_2$ . Такая структура формируется при спинодальном распаде сплавов на основе системы Fe–Cr–Co с объемно центрированной кубической решеткой. Данная модель использована для вычисления вклада энергии упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз в свободную энергию образования сплава, и с ее помощью получены уточненные значения концентраций компонентов в состоянии фазового равновесия.*

**E-mail: nickbelyakov@mail.ru, vintaik@mx.bmstu.ru**

**Ключевые слова:** *многокомпонентные магнито жесткие сплавы на основе системы Fe–Cr–Co, фазовое равновесие, упругие деформации кристаллических решеток, свободная энергия образования сплава, термодинамическое моделирование.*

Существенную роль в процессах формирования структуры и набора магнитных и механических свойств высококоэрцитивных сплавов на основе системы Fe–Cr–Co может играть энергия упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных ферромагнитной  $\alpha_1$  и парамагнитной  $\alpha_2$  фаз, которые образуются в течение спинодального распада пересыщенного твердого раствора на основе  $\alpha$ -железа, имеющего объемно центрированную кубическую (ОЦК) решетку [1]. Величина этой энергии зависит от характера когерентного сопряжения фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , а также от значения разности параметров решеток этих фаз (т.е. фактически от структуры материала). Этот фактор может оказывать влияние на форму области расслоения  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$  и на распределение легирующих элементов между фазами.

Наиболее заметным этот эффект может оказаться в районе гребня области расслоения, где изменения свободной энергии при образовании двухфазной системы малы [2]. Влияние энергии упругих деформаций решеток на формирование структуры может оказаться особенно значительным, если в качестве легирующих элементов в системе Fe–Cr–Co использовать молибден или вольфрам, которые при расслоении  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$  распределяются преимущественно в парамагнитную

фазу и увеличивают разность параметров решеток ферромагнитной и парамагнитной фаз [2]. В случае малой разности параметров решеток, например, в тройном сплаве или при легировании алюминием и ниобием, величина энергии упругих деформаций мала и ею, как правило, при расчетах можно пренебречь.

Целью данной работы являются разработка методики учета энергии упругих деформаций и ее приложение к термодинамической модели, описывающей процессы формирования фазового равновесия в многокомпонентных магнито жестких сплавах на основе системы Fe–Cr–Co [2].

**Методика исследований.** В сплавах на основе системы Fe–Cr–Co в процессе расслоения  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$  при малой объемной доле ферромагнитной фазы  $\alpha_1$  (0,10–0,25) в условиях термомагнитной обработки с полем, направление которого совпадает с кристаллографическим направлением [001], формируются структуры с сильно вытянутыми по направлению [001] (игольчатыми) выделениями фазы  $\alpha_1$ . Подобная структура в системах с большой разностью параметров решеток наблюдается при сложной термической обработке и без внешнего поля. Согласно экспериментальным исследованиям [1, 3], сильно вытянутые выделения фазы  $\alpha_1$  имеют квадратное поперечное сечение, квазипериодически расположены в плоскости, перпендикулярной направлению вытянутости [001], и изолированы прослойками парамагнитной фазы  $\alpha_2$ . Размеры выделений вдоль направления [001] примерно на порядок превышают размеры вдоль перпендикулярных ему направлений [100] и [010]. При этом наблюдается приблизительное равенство друг другу параметров решетки фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  вдоль направления [001]. В результате термической обработки при понижающейся температуре и ступенчатого отпуска происходит увеличение площади поперечного сечения выделений фазы  $\alpha_1$  за счет прослоек фазы  $\alpha_2$ . При этом участки фазы  $\alpha_2$  стремятся растянуть частицу фазы  $\alpha_1$  вдоль [001]. Такая структура оптимальна с точки зрения магнитных свойств во многих отношениях (как по вытянутости выделений, так и по их изолированности) и обеспечивает высокие магнитные свойства материала [4]. Поэтому изучение такой структуры важно для получения постоянных магнитов с высокими свойствами и ее целесообразно включить в рассматриваемую модель сплавов Fe–Cr–Co. Однако, как показали исследования, эта структура метастабильна по отношению к структуре пластинчатых выделений, рассмотренной в [5], поскольку энергия упругих деформаций пластинчатых выделений, как следует из расчета, меньше, чем игольчатых. Поэтому для формирования этой структуры требуются специальная многоэтапная термическая обработка, а также использование монокристаллов в качестве исходного материала, поскольку

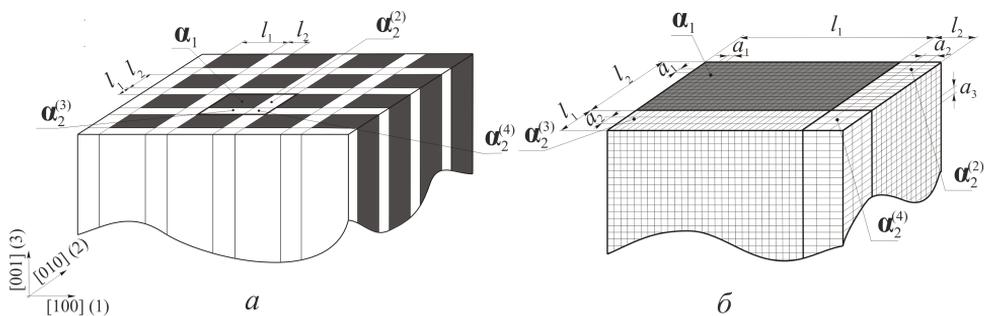


Рис. 1. Модель периодической структуры, возникающей при когерентном сопряжении фаз в случае игольчатых выделений ферромагнитной фазы (а) и схема когерентного сопряжения в такой структуре (б)

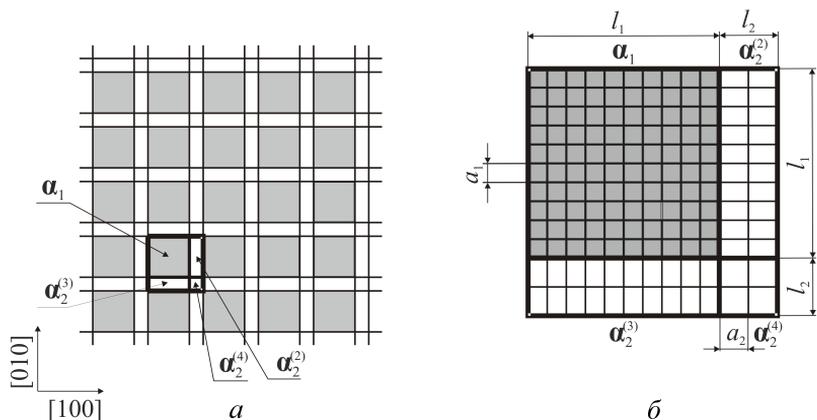


Рис. 2. Поперечное сечение периодической структуры, изображенной на рис. 1

зерна поликристалла сильно разориентированы, что не позволяет выделить направление  $[001]$ . Эти факты заметно усложняют разработку такого материала.

Приведенные наблюдения позволяют предложить модель периодической структуры и вычислить на основе этой модели вклад энергии упругих деформаций в свободную энергию образования такой двухфазной системы. На рис. 1, а изображен общий вид моделируемой структуры, на рис. 2, а — ее поперечное сечение, перпендикулярное направлению  $[001]$ . В рамках этой модели периодическая структура разбивается на повторяющиеся области фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , показанные на рис. 1 и 2. При этом выделяются три подобласти, отвечающие парамагнитной матрице  $\alpha_2$ , которые обозначим  $\alpha_2^{(2)}$ ,  $\alpha_2^{(3)}$ ,  $\alpha_2^{(4)}$ . В рамках модели предполагается, что на границах раздела областей плоскости типа  $\{100\}$  не терпят разрывов и изгибов, а выделения фазы  $\alpha_1$  по  $[001]$  являются сколь угодно длинными (но конечной длины). При этом области фазы  $\alpha_2$  стремятся растянуть частицу фазы  $\alpha_1$  вдоль  $[001]$ , а частицы фазы  $\alpha_1$  вызывают сжатие областей  $\alpha_2^{(2)}$  и  $\alpha_2^{(3)}$  по направлениям, параллельным плоскости сопряжения с ними, и растяжение

областей  $\alpha_2^{(2)}$  и  $\alpha_2^{(3)}$  в направлении, перпендикулярном этой плоскости. Вдоль направления вытянутости частиц [001] в условиях когерентного сопряжения все подобласти имеют одинаковый параметр решетки, равный  $a_3$  (рис. 1, б). По направлениям соответственно [010] и [100] параметры решеток областей  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2^{(2)}$  и  $\alpha_2^{(3)}$  совпадают и равны  $a_1$  (см. рис. 1, б и 2, б). В то же время вдоль направлений соответственно [100] и [010] совпадают и равны величине  $a_2$  параметры решетки областей  $\alpha_2^{(2)}$  и  $\alpha_2^{(3)}$ . Параметр решетки подобласти  $\alpha_2^{(4)}$  равен  $a_2$ . Таким образом, предлагаемая модель периодической структуры характеризуется тремя параметрами решеток  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ , которые необходимо найти для вычисления вклада энергии упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз в свободную энергию образования системы.

Запишем условия упругого равновесия всех областей фаз. Для этого выберем прямоугольную систему координат с осями вдоль направлений типа  $\langle 100 \rangle$  ОЦК-решетки, где все деформации можно свести к растяжениям и сжатиям областей вдоль осей, т. е. не рассматривать касательные компоненты тензора напряжений. За ось 1 примем направление [100] кристаллической решетки, за ось 2 — направление [010], а за ось 3 — направление вытянутости выделений [001]. Тогда условия упругого равновесия областей фаз можем записать в виде системы

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_1^1 l_1 l_3 + \sigma_1^3 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_1^2 l_1 l_3 + \sigma_1^4 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_2^1 l_1 l_3 + \sigma_2^2 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_2^3 l_1 l_3 + \sigma_2^4 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_3^1 l_1^2 + \sigma_3^2 l_1 l_2 + \sigma_3^3 l_1 l_2 + \sigma_3^4 l_2^2 = 0. \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_i^j$  — компоненты тензора напряжений, соответствующие  $j$ -й подобласти вдоль оси  $i$ ;  $l_i$  — линейные размеры подобластей фаз,  $i = 1, 2, 3$ ,  $j = 1, \dots, 4$  (при этом компонента с  $j = 1$  соответствует области ферромагнитной фазы  $\alpha_1$ , а компоненты с  $j = 2, 3, 4$  — подобластям парамагнитной матрицы  $\alpha_2^{(j)}$ ).

С учетом симметрии поперечного сечения относительно диагонали система (1) принимает вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_1^1 l_1 l_3 + \sigma_1^3 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_1^2 l_1 l_3 + \sigma_1^4 l_2 l_3 = 0, \\ \sigma_3^1 l_1^2 + \sigma_3^2 l_1 l_2 + \sigma_3^3 l_1 l_2 + \sigma_3^4 l_2^2 = 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

Далее перейдем от напряжений кристаллических решеток к их деформациям, используя соотношение

$$\sigma_p = \sum_{q=1}^6 c_{pq} \varepsilon_q, \quad (3)$$

где  $c_{pq}$  — константы упругости решеток. Сдвиговые деформации равны нулю:  $\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0$ . Воспользуемся также соотношением, связывающим величины относительных деформаций с параметрами решетки в деформированном и недеформированном состояниях:

$$\varepsilon_i = \frac{a_i - a_i^0}{a_i^0}, \quad (4)$$

где  $a_i$  — некоторый параметр решетки в деформированном состоянии;  $a_i^0$  — соответствующий параметр в недеформированном состоянии вдоль оси  $i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Параметры ОЦК-решеток фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  в недеформированном состоянии  $a_{10}$  и  $a_{20}$  вычислены по параметрам ОЦК-решеток чистых элементов, входящих в рассматриваемый сплав, в приближении линейной зависимости параметра решетки от состава твердого раствора [5, 6]. Значения параметров ОЦК-решеток, нм, компонентов в чистом виде по данным [6, 7] приведены ниже:

Al.....	0,32440
Co.....	0,28090
Cr.....	0,28840
Fe.....	0,28664
Mo.....	0,31472
Nb.....	0,33220
Ti.....	0,32410
V.....	0,29920
W.....	0,31900

Подставляя соотношения (3) и (4) в систему (2) и учитывая, что ввиду симметрии ОЦК-решетки  $c_{11} = c_{22} = c_{33} = 2,28 \cdot 10^{11}$  Н/м<sup>2</sup>,  $c_{12} = c_{13} = c_{23} = 1,29 \cdot 10^{11}$  Н/м<sup>2</sup>,  $c_{44} = c_{55} = c_{66}$ , а остальные  $c_{pq} = 0$  [8], получаем систему

$$\left\{ \begin{aligned} & \left( c_{11} \frac{a_1 - a_1^0}{a_1^0} + c_{12} \frac{a_1 - a_1^0}{a_1^0} + c_{12} \frac{c - a_1^0}{a_1^0} \right) l_1 l_3 + \\ & \quad + \left( c_{11} \frac{a_1 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_3 - a_2^0}{a_2^0} \right) l_2 l_3 = 0, \\ & \left( c_{11} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_1 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{c - a_2^0}{a_2^0} \right) l_1 l_3 + \\ & \quad + \left( c_{11} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_3 - a_2^0}{a_2^0} \right) l_2 l_3 = 0, \\ & \left( c_{12} \frac{a_1 - a_1^0}{a_1^0} + c_{12} \frac{a_1 - a_1^0}{a_1^0} + c_{11} \frac{a_3 - a_1^0}{a_1^0} \right) l_1^2 + \\ & \quad + \left( c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_1 - a_2^0}{a_2^0} + c_{11} \frac{a_3 - a_2^0}{a_2^0} \right) l_1 l_2 + \\ & \quad + \left( c_{12} \frac{a_1 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{11} \frac{a_3 - a_2^0}{a_2^0} \right) l_1 l_2 + \\ & \quad + \left( c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{12} \frac{a_2 - a_2^0}{a_2^0} + c_{11} \frac{a_3 - a_2^0}{a_2^0} \right) l_2^2 = 0, \end{aligned} \right.$$

в которой необходимо знать только соотношение линейных размеров областей  $l_1, l_2$  в поперечном сечении. Поскольку нас интересует именно соотношение линейных размеров, то было принято, что  $l_1 + l_2 = 1$ . Поэтому в уравнениях множители вида  $l_1 + l_2$  опущены. Соотношение линейных размеров областей фаз можно найти из уравнения, выражающего отношение объемных долей фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  через отношение площадей соответствующих областей в поперечном сечении:

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \frac{l_1^2}{(l_2^2 + 2l_1 l_2)},$$

где  $\nu_i$  — объемная доля фазы  $\alpha_i$ . Соотношение объемных долей фаз в равновесии можно найти в рамках модели фазового равновесия сплавов Fe–Cr–Co [2].

Упростим полученную систему с учетом указанных допущений:

$$\left\{ \begin{aligned} & a_1 \left( \frac{c_{11} + c_{12}}{a_1^0} l_1 + \frac{c_{11}}{a_2^0} l_2 \right) + a_2 \frac{c_{12}}{a_2^0} l_2 + a_3 c_{12} \left( \frac{l_1}{a_1^0} + \frac{l_2}{a_2^0} \right) = \\ & = c_{11} + 2c_{12}, \\ & a_1 \frac{c_{12}}{a_2^0} l_1 + \frac{a_2}{a_2^0} (c_{11} l_1 + (c_{11} + c_{12}) l_2) + a_3 \frac{c_{12}}{a_1^0} = c_{11} + 2c_{12}, \quad (5) \\ & 2a_1 c_{12} l_1 \left( \frac{l_1}{a_1^0} + \frac{l_2}{a_2^0} \right) + 2a_2 \frac{c_{12} l_2}{a_2^0} + a_3 c_{11} \left( \frac{l_1^2}{a_1^0} + \frac{2l_1 l_2}{a_2^0} + \frac{l_2^2}{a_2^0} \right) = \\ & = c_{11} + 2c_{12}. \end{aligned} \right.$$

Решая систему (5), которая имеет линейный относительно искомым параметрам  $a_1, a_2, a_3$  вид, можно вычислить значения параметров решетки  $a_1, a_2, a_3$  в деформированном состоянии, после чего, используя известные параметры решетки в недеформированном состоянии, с помощью выражений вида (4) найти величины относительных деформаций  $\varepsilon_i^j$  всех подобластей,  $i = 1, 2, 3, j = 1, \dots, 4$ . Затем можно найти величину вклада упругих деформаций фаз в свободную энергию образования  $j$ -й подобласти [8]

$$\Delta_f F_e^j = \frac{c_{11}}{2} \sum_{i=1}^3 (\varepsilon_i^j)^2 + c_{12} (\varepsilon_1^j \varepsilon_2^j + \varepsilon_1^j \varepsilon_3^j + \varepsilon_2^j \varepsilon_3^j)$$

и двухфазного сплава

$$\Delta_f F_{e2p} = l_1^2 \Delta_f F_5^1 + l_1 l_2 \Delta_f F_5^2 + l_1 l_2 \Delta_f F_5^3 + l_2^2 \Delta_f F_5^4. \quad (6)$$

Индекс  $f$  свидетельствует о том, что изменение данной термодинамической величины относится к образованию (formation) системы (смешению раствора), индекс  $e$  означает, что речь идет об упругих (elastic) деформациях, а индекс  $2p$  — что рассматривается двухфазная система.

Функция (6) используется как аддитивная поправка для уточнения выражения для молярной свободной энергии образования двухфазного сплава на основе системы Fe–Cr–Co:

$$\Delta_f F_{\text{полн}}(\mathbf{x}, T, \boldsymbol{\nu}) = \Delta_f F_{2p}(x, T, \nu) + \Delta_f F_{e2p}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu}). \quad (7)$$

Здесь  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_N)^T$  — состав  $N$ -компонентного сплава;  $T$  — абсолютная температура,  $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2)^T$  — вектор объемных долей фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ ;  $\Delta_f F_{2p}(\mathbf{x}, T, \nu)$  — молярная свободная энергия образования двухфазной системы, формирующейся при распаде  $\alpha$ -фазы. Значения этой функции для всех значений аргументов можно вычислить в рамках модели фазового равновесия сплавов на основе Fe–Cr–Co. Например, согласно модели [2], выражение для этой функции имеет вид

$$\Delta_f F_{2p}(\mathbf{x}, T, \boldsymbol{\nu}) = \nu_1 \Delta_f F(\mathbf{x}_1, T) + \nu_2 \Delta_f F(\mathbf{x}_2, T),$$

где  $\nu_j$  и  $\Delta_f F(\mathbf{x}_j, T)$  — соответственно объемная доля и свободная энергия образования фазы  $j$ , имеющей в случае  $N$ -компонентного сплава состав  $\mathbf{x}_j = (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{ij}, \dots, x_{Nj})^T$ ,  $j = 1, 2$ . Модельные выражения для молярной свободной энергии образования одной твердорастворной фазы сплавов на основе Fe–Cr–Co приведены в работе [2] и имеют достаточно громоздкий вид.

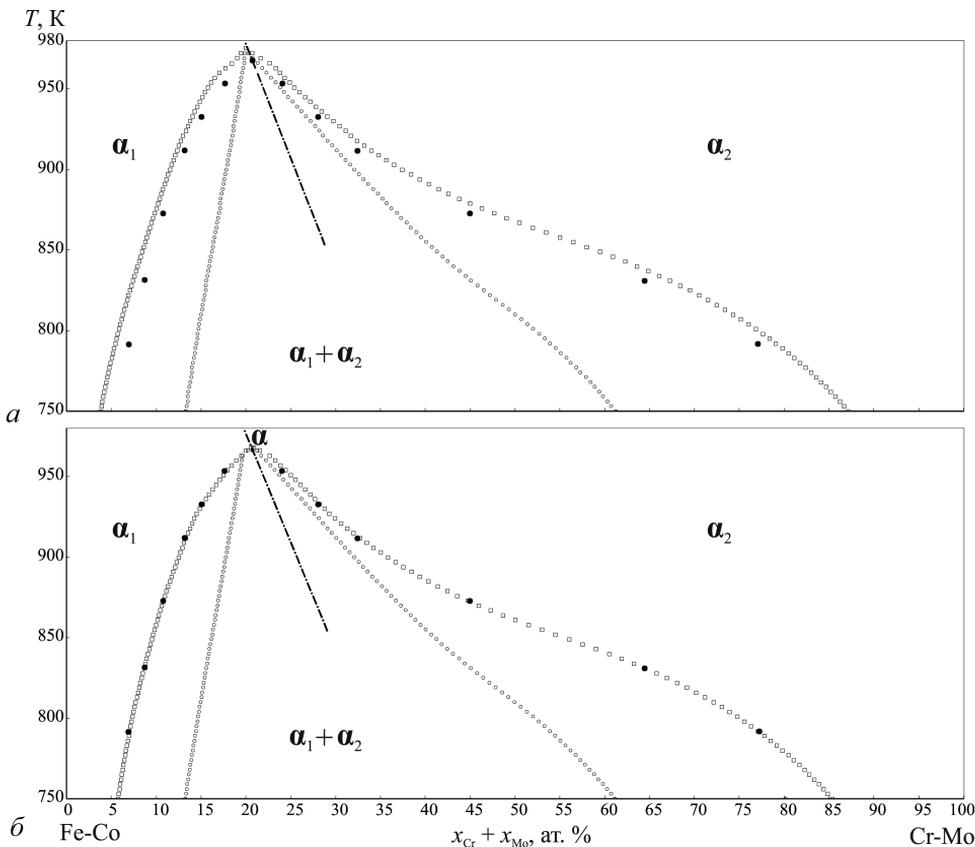
Функция (7) задается на множестве всех возможных составов и мольных долей сплава. Для нахождения равновесных составов сплавов необходимо минимизировать функцию (7) на указанном множестве для каждого значения температуры некоторого рассматриваемого

температурного интервала. Таким образом, исходная задача сводится к задаче условной минимизации функции свободной энергии образования сплава (7) в пространстве составов и объемных долей фаз, которая имеет достаточно громоздкий вид: например, с использованием метода штрафных функций [9] в общем случае требуется большой объем вычислений. Для эффективного решения этой задачи предложена адаптивная схема организации параллельных вычислений в современных многопроцессорных вычислительных системах с общей памятью с динамическим распределением нагрузки на вычислительные ядра [10].

На основании полученных в результате вычислений данных можно строить сечения фазовых диаграмм в заданных областях составов, не прибегая к трудоемким и продолжительным натурным экспериментам.

**Результаты исследований.** Используя предложенную модель, с помощью расчетов получено, что легирование в количестве до 5 ат. % тройных сплавов Fe–Cr–Co такими элементами, как молибден и вольфрам, а также элементами, имеющими параметры решетки больше, чем такие параметры железа, хрома, кобальта, приводит к увеличению разности параметров решеток ферромагнитной и парамагнитной фаз за счет преимущественного распределения этих элементов в фазу  $\alpha_2$ , что согласуется с экспериментальными данными [3]. Это способствует анизотропному распаду и усиливает эффект термомагнитной обработки: выделения фазы ориентируются преимущественно вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  и значительно вытягиваются. Магнитные свойства такого материала значительно возрастают, хотя наблюдается ухудшение пластичности [4]. Однако магнитные свойства этих сплавов получаются очень высокими. Заметную роль в формировании структуры в данном случае играет энергия упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз. Например, при легировании молибденом в количестве 5 ат. % вследствие влияния упругой энергии происходит некоторое сужение области расслоения, слабое в ее широкой (низкотемпературной) области и заметное в области гребня, что приводит к некоторому снижению критических температур. Это видно на рис. 3, на котором показан вычисленный в рамках модели участок вертикального сечения фазовой диаграммы сплавов системы Fe–Cr–Co, содержащих 15 ат. % кобальта и легированных молибденом в количестве 5 ат. %. При расчете диаграммы (рис. 3, а) влияние энергии упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  не учитывалось. Расчет производился по схеме, указанной в работе [2]. На рис. 3, б приведена диаграмма, построенная с учетом влияния этой энергии.

В работе предложена модель структуры сильно вытянутых по направлению [001] (“игольчатых”) выделений ферромагнитной фазы  $\alpha_1$ ,



**Рис. 3. Вычисленное вертикальное сечение области расслоения  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$  ( $\square$ ) и спинопальной области ( $\circ$ ) для сплавов Fe-Cr-Co-Mo, содержащих 15 ат. % Co и 5 ат. % Mo:**

*a* — без учета влияния энергии упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз; *b* — с учетом этого влияния;  $\bullet$  — экспериментальные точки;  $-\cdot-$  — линия точек Кюри (соответствующее сечение поверхности точек Кюри)

изолированных прослойками парамагнитной матрицы  $\alpha_2$ , которой соответствуют наиболее высококоэрцитивные магнитные свойства сплавов на основе системы Fe-Cr-Co. Влияние энергии упругих деформаций наиболее существенно при легировании сплава компонентами, увеличивающими разность параметров решетки фаз, например, молибденом и вольфрамом, и приводит к некоторому сужению области расслоения  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$ . В случае тройных сплавов Fe-Cr-Co или при легировании элементами, уменьшающими разность параметров решеток, влияние энергии упругих деформаций несущественно и в расчетах ею можно пренебречь.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Б е л я ц к а я И. С. О формировании высококоэрцитивного состояния в сплавах на основе Fe-Cr-Co // *Металлы*. — 1984. — № 1. — С. 97–103.

2. Беляков Н. А., Винтайкин Б. Е. Термодинамическое моделирование формирования фазового равновесия в многокомпонентных сплавах, испытывающих расслоение с образованием магнитно упорядоченной фазы // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2011. – № 1 (667). – С. 41–46.
3. Беляцкая И. С., Винтайкин Е. З., Меженный Ю. О. О структурных особенностях распада в высококоэрцитивных сплавах на основе Fe–Cr–Co // *Физика металлов и металловедение*. – 1983. – Т. 55, № 5. – С. 960–966.
4. Винтайкин Б. Е. Закономерности формирования структуры и магнитных свойств магнитомягких сплавов на основе Fe–Cr–Co // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 1997. – № 12. – С. 12–14.
5. Винтайкин Б. Е., Кузьмин Р. Н. Термодинамическое исследование процесса расслоения  $\alpha \rightarrow \alpha_1 + \alpha_2$  в высококоэрцитивных сплавах Fe–Cr–Co, Fe–Cr–Co–Mo, Fe–Cr–Co–W, Fe–Cr–Co–Nb // *Металлофизика*. – 1987. – Т. 9, № 3. – С. 16–21.
6. Гинье А. Рентгенография кристаллов: пер. с фр. / под ред. Н.В. Белова. – М.: Изд-во ФИЗМАТЛИТ, 1961. – 604 с.
7. A priori stability in comparison with CALPHAD lattice stability / Y. Wang, S. Curtarolo, C. Jiang, R. Arroyave, T. Wang, G. Ceder, L.-Q. Chen, Z.-K. Liu // *Calphad*. – 2004. – Vol. 28, No. 1. – P. 79–90.
8. Смирнов А. А. Молекулярно-кинетическая теория металлов: Монография. – М.: Наука, 1966. – 488 с.
9. Аттетков А. В., Галкин С. В., Зарубин В. С. Методы оптимизации. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. – 440 с.
10. Беляков Н. А. Разработка объектно-ориентированной системы для организации параллельных вычислений в SMP-системах и ее приложение к задачам термодинамического моделирования // *Современные информационные технологии и ИТ-образование* // Сб. научн. тр. VI Междунар. научно-практ. конф. / под ред. В.А. Сухомлина. – М.: МГУ, 2011. – Т. 1. – С. 678–686.

Статья поступила в редакцию 05.07.2012