

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО И ПЕРВОПРИНЦИПНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ Fe–V

А.А. Мирзоев, А.В. Верховых

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

Аннотация. Концентрационные зависимости среднего магнитного момента сплава и энтальпии растворения как функции концентрации ванадия изучены в области от 1 до 10 ат. % для неупорядоченного твердого раствора Fe–V в упорядоченном магнитном состоянии с использованием первопринципных расчетов электронной структуры в программном пакете WIEN2k. Полученные результаты сопоставлены с имеющимися в мировой литературе данными, полученными в CALPHAD-моделях. На этой основе сделан вывод о перспективах поиска возможной инверсии ближнего порядка в сплавах Fe–V по аналогии с инверсией в системе Fe–Cr.

Ключевые слова: *ab initio* моделирование; твердые растворы Fe–V; магнитные моменты; энтальпия растворения.

Восьмидесятилетию юбилею
ЮУрГУ посвящается

Введение

Твердые растворы железа с переходными элементами (Ni, Cr, Co, Mn, V) играют важную роль при конструировании специальных сталей (нержавеющие, жаропрочные, хладостойкие), поэтому история их изучения насчитывает многие десятилетия. Тем не менее, до сих пор многие термодинамические характеристики данной системы не могут считаться достоверными [1]. Это связано с тем, что термодинамическое описание методом CALPHAD требует знания разности энергий гамма- и альфа-фаз при нуле Кельвина, а энергия гамма-фазы определяется по измерениям теплоёмкости, активности, теплоты смешения в достаточно узком интервале концентраций и температур. Соответственно, экстраполяции данных эксперимента на 0 К приводит к значительной погрешности в определении энергии гамма-фазы.

Анализ результатов моделирования фазовых диаграмм и термодинамических свойств бинарных систем Fe–Cr, полученных в ряде работ (см., например, [2]), выявил принципиальные ошибки в работах, где их рассчитывают по методу CALPHAD. Так, теплота образования данных сплавов считается положительной во всем диапазоне концентраций [3], т. е. данные сплавы при низких температурах должны расслаиваться на области, обогащенные хромом и обогащенные железом (сегрегирующие сплавы). Однако с помощью нейтронографического анализа в 1984 г. [4] было показано, что параметр ближнего порядка Каули примеси Cr отрицателен при малых концентрациях, что свидетельствует о ближнем упорядочении. С увеличением концентрации выше 10 ат. % наблюдается инверсия знака этого параметра, что приводит к короткодействующей сегрегации. Этот вывод был подтвержден и уточнен в более поздней работе [5]. Более того, Сагарадзе и др. [6] обнаружили, что сплавы Fe–Cr с 5 и 9 мас. % Cr действительно демонстрируют упорядочение после термического отжига и электронного облучения, в то время как в сплавах с концентрацией Cr 13 % и выше наблюдается образование фазы, богатой Cr.

Для выяснения атомистических деталей такого поведения сплавов Fe–Cr был проведен ряд *ab initio* исследований, в которых были рассчитаны энергии смешения и энергии взаимодействия между атомами компонентов [7–9]. Было показано, что инверсия типа SRO в твердом растворе Fe–Cr обусловлена взаимным отталкиванием атомов Cr в матрице Fe при низкой концентрации и их притяжением при более высокой концентрации. Смена знака энергии взаимодействия имеет магнитную природу [8]. Обнаружено, что магнитный момент растворённых атомов Cr устанавливается антипараллельно моментам атомов ферромагнитного железа. Но по мере роста концентрации хрома между атомами которого также существует антиферромагнитное взаимодействие, возникает эффект магнитной фрустрации. При этом магнитная энергия сплава резко понижается, уменьшается и средний магнитный момент. Близкое поведение наблюдается и в системе Fe–V.

Магнитный момент одиночной примеси ванадия в железе при 0 К также антипараллелен магнитному моменту матрицы железа, а отталкивающее взаимодействие пары близкорасположенных атомов ванадия еще сильнее, чем у пары атомов хрома в Fe [10]. Отметим также существенное изменение магнитных свойств сплавов с ростом содержания V, приводящее к образованию максимума на концентрационной зависимости точки Кюри, в полной аналогии со сплавами системы Fe–Cr [11]. Это позволяет предположить, что в системе Fe–V в области небольших содержаний ванадия также можно ожидать изменения типа ближнего упорядочения, а также особенность энергии (энтальпии) смешения. Следует отметить, что существующие термодинамические CALPHAD-расчеты характеризуют ОЦК систему Fe–V, как систему с отрицательной энергией смешения во всем диапазоне концентраций [11–13]. Но, как отмечалось выше, CALPHAD-расчеты могут содержать существенные ошибки из-за того, что многие параметры модели определяются в высокотемпературной парамагнитной области и не учитывают существенный вклад, связанный с магнитным упорядочением. В связи с этим указанную инверсию типа упорядочения проще обнаружить, используя методы первопринципного компьютерного моделирования в рамках теории функционала плотности (DFT).

Несмотря на то, что ванадийсодержащие стали широко используются в промышленности и история их экспериментального изучения насчитывает десятки лет, теория процессов легирования сталей ванадием весьма далека от завершения. Укажем, что ряд основных термодинамических параметров, используемых для расчетов фазовых диаграмм (CALPHAD), которые не могут быть определены термодинамическими методами, например энергия неустойчивой ГЦК-фазы чистого ванадия, имеют очень широкий разброс. Так, в работе [11] разность энтальпий образования ГЦК и ОЦК фаз чистого ванадия составляла 9 000 Дж/моль, в работе [12] – 7500 Дж/моль, а в работе В.-J. Lee [13] она уже имеет значение 12 253 Дж/моль. Это говорит о том, что температурная зависимость энергии смешения, которая используется при экстраполяции на 0 К, определена с аналогичной погрешностью. Несомненно, что устранить указанную неопределенность можно при помощи первопринципного моделирования, чтобы получить правильные значения параметров стабильности фаз в области малых температур. Такое моделирование превратилось в весьма точный метод расчета, позволяющий воспроизводить свойства материалов с точностью, часто не уступающей точности лучших экспериментальных данных. Однако, в отличие от родственной системы Fe–Cr, для которой число публикаций, посвященных *ab initio* компьютерному моделированию, исчисляется десятками, работ по моделированию системы Fe–V очень немного. К тому же они либо были выполнены в 80-е годы [14], когда точность вычислений была не слишком высока, либо рассматривают лишь отдельные вопросы: примеси ванадия в железе [15], зависимость плотности электронных состояний от концентрации [16]. Наиболее полное и близкое к цели проекта исследование можно найти в работе О. Горбатова и Ю. Горностырева [17]. Однако и в этой работе рассмотрена лишь ограниченная область концентрации твердых растворов Fe–V, поэтому вопросы об аномальном поведении температуры Кюри и энтальпия смешения не обсуждались. Таким образом, для понимания физических особенностей системы Fe–V, несомненно, требуется проведение не только более точных, но и более широких по концентрации первопринципных расчетов. В случае неупорядоченных сплавов, обладающих магнитными свойствами, ситуация проведения DFT-расчетов существенно усложняется. Дело в том, что результаты моделирования должны быть усреднены по всем возможным конфигурациям в расположении атомов компонентов и ориентациям их магнитных моментов. Это приводит к необходимости выбора некоторой процедуры усреднения и в то же время, к резкому увеличению объема вычислений. По этой причине большая часть расчетов неупорядоченных сплавов проводилась при помощи приближения когерентного потенциала [7]. Однако следует отметить, что приближение когерентного потенциала существенно занижает локальные корреляции в расположении магнитных моментов, что при решении задач образования локальных магнитных или структурных кластеров может приводить к неточностям. Поэтому в ряде случаев необходимо проведение времязатратного, но прямого расчета энергии смешения для различных атомных и магнитных конфигураций неупорядоченного сплава, чтобы выявить указанный эффект.

В силу указанных обстоятельств, прежде чем приступить к обширной программе расчетов энергии смешения для растворов замещения Fe–V, мы посчитали нужным провести первоначальные DFT-расчеты средних магнитных моментов сплава и энтальпии растворения в магнито-

упорядоченном состоянии при 0 К как функции концентрации V, а затем сопоставить с имеющимися в литературе термодинамическими данными. В случае значительной нестыковки расчетных DFT-данных по энтальпии растворения с термодинамическими данными, полученными для парамагнитной области, можно надеяться, что учет энергии магнитного упорядочения способен обеспечить инверсию ближнего порядка и смену знака энергии смещения в растворах Fe–V. В связи с этим основными задачами данной работы являются следующие:

1. Проведение первопринципного компьютерного моделирования неупорядоченного твердого раствора системы Fe–V в упорядоченном магнитном состоянии и изучение концентрационной зависимости среднего магнитного момента сплава и энтальпии растворения как функции концентрации ванадия в области от 1 до 10 ат. %;
2. Сопоставление полученных результатов с имеющимися в мировой литературе данными по величине магнитного момента и энтальпии растворения, полученными в CALPHAD-моделях. Заключение о перспективности поиска возможной инверсии ближнего порядка в сплавах Fe–V.

Обзор имеющихся термодинамических данных по системе Fe–V и методика первопринципного моделирования

Методы первопринципного компьютерного моделирования [18] позволяют рассчитать полную энергию модельного кристалла, образованного из периодически повторяющейся в пространстве элементарной ячейкой, в качестве которой берется определенная часть исследуемого неупорядоченного материала. Тем самым удается определить энергию неупорядоченного твердого раствора замещения при 0 К. Аналогичную величину можно получить с помощью методов термодинамики. Речь идет об энергии (энтальпии) смещения компонентов в растворе $E_{см}$, которая для бинарного раствора при $T = \text{const}$ представляет разность между энергией раствора и энергиями чистых компонентов B и C, взятых в соответствующих пропорциях. В простейшем квазихимическом приближении [19]

$$E_{см} = A \cdot x_B \cdot x_C, \quad (1)$$

где $A = \frac{1}{2} zN(2\varepsilon_{BC} - \varepsilon_{CC} - \varepsilon_{BB})$ представляет энергию взаимообмена атомов сорта B и C. Таким образом, теплота смещения прямо выражается через энергии взаимодействия ε_{ij} атомов сорта i и j . Если принять, что изменение энтропии при растворении сводится к конфигурационной энтропии для неупорядоченного распределения атомов, то получается так называемая модель регулярных растворов [19]. В этом случае параметр A не должен зависеть от концентрации, но может изменяться при варьировании температуры. В следующем приближении используется модель субрегулярных растворов, согласно которой A зависит от концентрации. В этом случае общепринято использовать полином Редлиха–Кистера [20] для представления константы A бинарного раствора. Для бинарного раствора замещения со случайным смешиванием составляющих можно написать

$$A = \sum_{k=0}^n {}^k L_{A,B} (x_A - x_B)^k \cong {}^0 L_{A,B} + {}^1 L_{A,B} (x_A - x_B),$$

где k , $L_{A,B}$ – параметры Редлиха–Кистера. Экспериментальные измерения теплот смещения или параметров A проводят методами давления насыщенных паров, электрохимическим и калориметрическими методами, но, как правило, измерения проводятся при достаточно высоких температурах в парамагнитной области. В связи с этим экстраполяция экспериментальных результатов в область низких температур всегда сопряжена с риском ошибки.

В таблице приведены данные о термодинамических параметрах A^α и A^γ для γ - и α -твердых растворов ванадия в железе по различным литературным источникам. Здесь

$$A = \frac{\Delta G_{изб}}{x_A x_B} = \frac{E_{см}}{x_A x_B} - T \frac{\Delta S_{изб}}{x_A x_B}, \quad (2)$$

где $\Delta G_{изб}$ – есть избыточная величина свободной энергии смещения по отношению к идеальному раствору. В этом уравнении независимый от температуры член соответствует энергии смещения, а коэффициент при T выражается через избыточную энтропию смещения, которая часто оказывается независимой от температуры.

Термодинамические функции ОЦК сплавов Fe-V

N	${}^0L_{Fe,V}$, Дж/моль	${}^1L_{Fe,V}$, Дж/моль	Лит. источник
1	$-23980 + 1,5197 T$	$8020 + 2,5202 T$	[11]
2	$-23980 + 1,5197 T$	5020	[13]
3	$-21427 + 6,846T$	$7345 - 1,509 T$	[12]

На рис. 1 результаты CALPHAD-моделирования [11–13] сопоставлены с экспериментальными данными Спенсера [21]. Как видно из рис. 1 наилучшее согласие обеспечивает модель, предложенная в работе Андерссона [11], поэтому дальнейшее сравнение с результатами первопринципного моделирования будем проводить именно с ней.

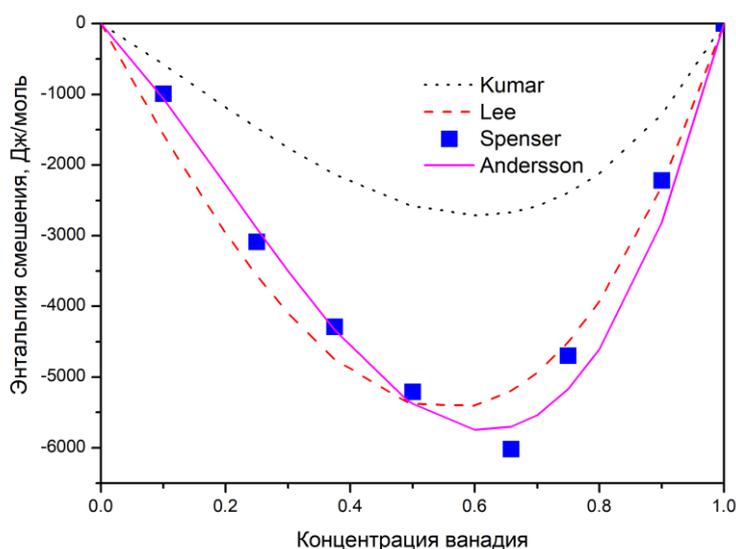


Рис. 1. Сравнение результатов CALPHAD-моделирования в работах [11–13] для $T = 1623$ К с экспериментальными данными Спенсера [21] для той же температуры

Результаты моделирования и обсуждение

Все расчеты были выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT) полнопотенциальным методом линейаризованных присоединенных плоских волн (FLAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA) в программном пакете WIEN2k. В качестве модельной системы была выбрана ферромагнитная суперячейка ОЦК-железа содержащая 200 атомов, которые частично замещались атомами ванадия. Интегрирование в k -пространстве выполнялось с использованием 27 k -точек сетки. Радиус muffin-tin сферы R_{mt} был равен 2,00 а.е. для атома железа и ванадия. Для всех систем была выбрана энергия обрезания 340 эВ. Критерием сходимости расчетов были воспроизведение полной энергии и заряда с точностью не менее 10^{-3} эВ, $10^{-3}e^-$ соответственно, а силы на каждом из атомов не превышали значения 0,01 эВ/Å. Все это обеспечивает погрешность результатов расчетов не более 0,01 эВ.

Величины магнитных моментов на атомах в неупорядоченных сплавах Fe–V определены в работе Алдредра [22]. Это позволило провести на рис. 2 детальное сравнение наших результатов с экспериментальными данными этой работы.

Видно, что результаты нашего расчета прекрасно согласуются с имеющимися экспериментальными данными по величинам магнитных моментов атомов в сплаве, что свидетельствует о достоверности проведенного моделирования.

На рис. 3 приведено сравнение результатов нашего моделирования энтальпии образования ОЦК сплавов системы Fe–V с данными CALPHAD-модели [11] при 0 К.

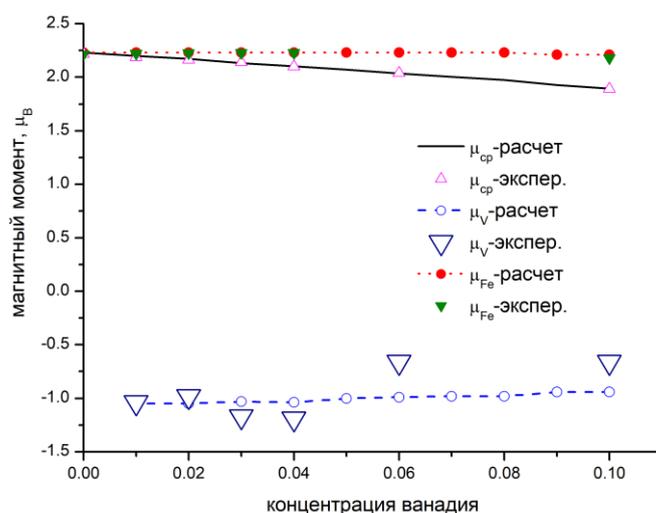


Рис. 2. Сравнение результатов *ab initio* расчета величин магнитных моментов (среднего момента на атом в сплаве, а также локальных моментов на атомах железа и ванадия) с экспериментальными значениями в работе Алдредра [22]

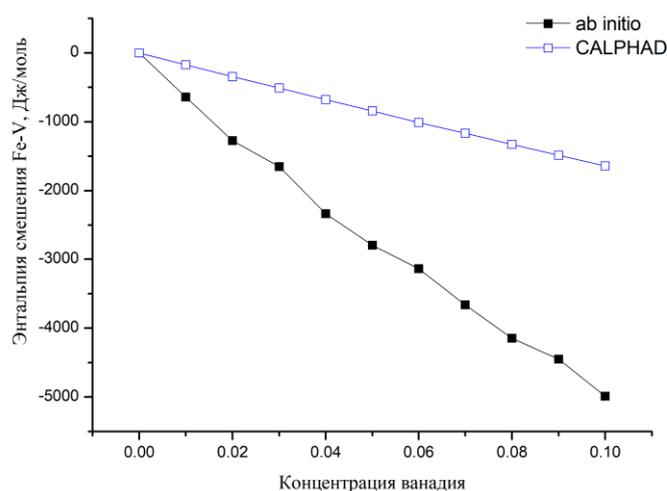


Рис. 3. Сравнение результатов *ab initio* расчета энтальпии смешения ОЦК сплавов Fe-V с данными CALPHAD-модели Андерссона [11]

Сравнение показывает, что термодинамическое моделирование существенно занижает энтальпию смешения сплавов Fe-V в рассмотренной области концентраций ванадия. Скорее всего, расхождение обусловлено тем, что CALPHAD-моделирование не учитывает вклад отрицательной энергии магнитного упорядочения, поскольку опирается на высокотемпературные термодинамические данные, полученные в парамагнитной области. В таком случае 3-кратное изменение энтальпии свидетельствует о значительном влиянии магнитного порядка на энергию смешения рассматриваемых сплавов. Как видно из рис. 2, рост содержания V в сплаве приводит к уменьшению магнитного момента на атомах ванадия. Можно предположить, что если этот спад будет быстрым, то отрицательный магнитный вклад в энтальпию может резко упасть. Это может привести к важным особенностям в ближнем упорядочении системы Fe-V. Однако поскольку химическая часть энтальпии данной системы отрицательна (в отличие от системы Fe-Cr), то инверсия ближнего порядка наблюдаться не будет. Тем не менее важно изучить изменение магнитных свойств системы Fe-V в широком диапазоне концентраций ванадия и установить их влияние на особенности ближнего порядка.

Выводы

Проведено первопринципное компьютерное моделирование неупорядоченного твердого раствора системы Fe–V в упорядоченном магнитном состоянии и изучена концентрационная зависимость среднего магнитного момента сплава и энтальпии растворения как функции концентрации ванадия в области от 1 до 10 ат. %. Сопоставление с имеющимися в мировой литературе данными по величинам магнитных моментов показало высокую точность и достоверность полученных результатов. Показано, что энтальпия смешения в этой области концентраций является отрицательной, что согласуется с данными CALPHAD-моделей [11–13], и противоречит результатам более ранней работы [23]. Сделан вывод, что возможность обнаружить инверсию ближнего порядка в сплавах Fe–V маловероятна, однако вполне возможны особенности ближнего упорядочения в данных сплавах на концентрационной зависимости.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-10039.

Литература

1. Miettinen, J. Thermodynamic Reassessment of Fe–Cr–Ni System with Emphasis on the Iron-Rich corner / J. Miettinen // *Calphad*. – 1999. – Vol. 23, Iss. 2. – P. 231–248.
2. Klaver, T.P.C. Magnetism and Thermodynamics of Defect-Free Fe–Cr Alloys / T.P.C. Klaver, R. Drautz, M.W. Finnis // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 74, Iss. 9. – P. 094435.
3. Кубашевский, О. *Металлургическая термохимия* / О. Кубашевский, С.Б. Олкокк. – М.: Металлургия, 1982. – 391 с.
4. Mirebeau, I. First Measurement of Short-Range-Order Inversion as a Function of Concentration in a Transition Alloy / I. Mirebeau, M. Hennion, G. Parette // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol. 53, Iss. 7. – P. 687–690.
5. Mirebeau, I. Neutron Study of the Short Range Order Inversion in Fe_{1-x}Cr_x / I. Mirebeau, G. Parette // *Phys. Rev. B*. – 2010. – Vol. 82, Iss. 10. – P. 104203.
6. Phase Transformations in Fe-Cr Alloys upon Thermal Aging and Electron Irradiation / V.A. Shabashov, V.V. Sagaradze, I.I. Kositsyna *et al.* // *Физика металлов и металловедение*. – 2001. – Т. 92, № 5. – С. 89–98.
7. Ruban A.V., Abrikosov I.A. Configurational Thermodynamics of Alloys from First Principles: Effective Cluster Interactions // *Reports on Progress in Physics*. – 2008. – Vol. 71, no. 4. – P. 46501.
8. Мирзоев, А.А. Расчет энергии смешения сплавов Fe–Cr первопринципными методами компьютерного моделирования / А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, Д.А. Мирзаев // *Физика металлов и металловедение*. – 2004. – Т. 97, № 4. – С. 11–16.
9. Olsson, P. Electronic Origin of the Anomalous Stability of Fe-Rich BCC Fe–Cr Alloys / P. Olsson, I.A. Abrikosov, J. Wallenius // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73, Iss. 10. – P. 104416–6.
10. Влияние магнетизма на растворимость 3d-элементов в ОЦК-Fe. результаты первопринципных исследований / О.И. Горбатов, С.В. Окатов, Ю.Н. Горностырев и др. // *Физика металлов и металловедение*. – 2013. – Т. 114. – № 8. – С. 698.
11. Andersson, J.-O. A Thermodynamic Evaluation of the Iron–Vanadium System / J.-O. Andersson // *Calphad*. – 1983. – Vol. 7, Iss. 4. – P. 305–315.
12. Hari Kumar, K.C. A Thermodynamic Reassessment of the Fe–V System / K.C. Hari Kumar, V. Raghavan // *Calphad*. – 1991. – Vol. 15, Iss. 3. – P. 307–314.
13. Lee, B.-J. A Thermodynamic Study on the V–C and Fe–V systems / B.-J. Lee, D.N. Lee // *Calphad*. – 1991. – Vol. 15, Iss. 3. – P. 283–291.
14. Johnson, D.D. The Slater–Pauling Curve: First Principles Calculations of the Moments of Fe_{1-c}Ni_c and V_{1-c}Fe_c / D.D. Johnson, F.J. Pinski, J.B. Staunton // *Journal of Applied Physics*. – 1987. – Vol. 61, Iss. 8. – P. 3715–3717.
15. First-Principles Investigation of Magnetism and Electronic Structures of Substitutional 3d-Transition-Metal Impurities in BCC Fe / G. Rahman, I.G. Kim, H.K.D.H. Bhadeshia, A.J. Freeman // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81, Iss. 18. – P. 184423.
16. Krause, J.C. Electronic Structure of Disordered Fe–V Alloys / J.C. Krause, C. Paduani, J. Schaff, M.I. da Costa, Jr. // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 57, Iss. 2. – P. 857–861.
17. Влияние магнетизма на растворимость 3d-элементов в ОЦК-Fe результаты первопринципных исследований / О.И. Горбатов, С.В. Окатов, Ю.Н. Горностырев и др. // *Физика металлов и металловедение*. – 2013. – Т. 114, № 8. – С. 698–710.

18. Schwarz, K. Electronic Structure Calculations of Solids using the WIEN2k Package for Material Science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147, Iss. 1-2. – P. 71–76.

19. Sandman, B. A Regular Solution Model for Phase with Several Components and Sublattices, Suitable for Computer Applications / B. Sandman, J. Agren // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1981. – Vol. 42, Iss. 4. – P. 297–301.

20. Redlich, O. Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions / O. Redlich, A.T. Kister // *Industrial & Engineering Chemistry*. – 1948. – Vol. 40, Iss. 2. – P. 345–348.

21. Smith, J.F. The Fe–V (Iron–Vanadium) system / J.F. Smith // *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*. – 1984. – Vol. 5. – P. 184–194.

22. Nevitt, M.V. Ferromagnetism in V–Fe and Cr–Fe Alloys / M.V. Nevitt, A.T. Aldred // *Journal of Applied Physics*. – 1963. – Vol. 34, Iss. 3. – P. 463–468.

23. Aldred, A.T. Thermodynamic Properties of Solid Vanadium–Iron Alloys / A.T. Aldred, K.M. Myles // *J. Phys. Chem.* – 1964. – Vol. 68, Iss. 1. – P. 64–69.

Поступила в редакцию 22 августа 2023 г.

Сведения об авторах

Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: mirzoevaa@susu.ru.

Верховых Анастасия Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: avverkhovykh@susu.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2023, vol. 15, no. 4, pp. 68–76*

DOI: 10.14529/mmph230408

THE COMPARATIVE RESULTS OF THE THERMODYNAMIC AND FIRST-PRINCIPLE MODELING OF DISORDERED SOLUTIONS OF THE Fe–V SYSTEM

A.A. Mirzoev, A.V. Verkhovykh

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: mirzoevaa@susu.ru*

Abstract. This paper considers the concentration dependences of the average magnetic moment of the Fe–V system and solution enthalpy as a function of the vanadium concentration from 1 to 10 at% for a disordered Fe–V solid solution in an orderly magnetic state using first-principle calculations of the electronic structure in the WIEN2k software package. The results are compared with data obtained using CALPHAD-models in previous studies. A conclusion about the prospects of finding a possible inversion of the short-range order in Fe–V alloys similar to the inversion in Fe–Cr systems has been made on this basis.

Keywords: *ab initio modeling; Fe–V solid solutions; magnetic moments; solution enthalpy.*

References

1. Miettinen J. Thermodynamic Reassessment of Fe–Cr–Ni System with Emphasis on the Iron-Rich Corner. *Calphad*, 1999, Vol. 23, Iss. 2, pp. 231–248. DOI: 10.1016/s0364-5916(99)00027-9

2. Klaver T.P.C., Drautz R., Finnis M.W. Magnetism and Thermodynamics of Defect-Free Fe–Cr Alloys. *Physical Review B*, 2006, Vol. 74, Iss. 9, p. 094435. DOI:10.1103/physrevb.74.094435

3. Kubashewski O., Olkock S.B. *Metallurgical Thermochemistry*. Springer, Berlin, 1979, 449 p.

4. Mirebeau I., Hennion M., Parette G. First Measurement of Short-Range-Order Inversion as a Function of Concentration in a Transition Alloy. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, Vol. 53, Iss. 7, pp. 687–690. DOI:10.1103/physrevlett.53.687
5. Mirebeau I., Parette G. Neutron Study of the Short Range Order Inversion in Fe_{1-x}Cr_x. *Phys. Rev. B*, 2010, Vol. 82, Iss. 10, P. 104203. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.104203
6. Shabashov V.A., Sagaradze V.V., Kositsyna I.I., Arbuzov V.L., Filippov Y.I. Phase Transformations in Fe–Cr Alloys upon Thermal Aging and Electron Irradiation. *Phys. Met. Metallogr.*, 2001, Vol. 92, Iss. 5, pp. 508–517.
7. Ruban A.V., Abrikosov I.A. Configurational Thermodynamics of Alloys from First Principles: Effective Cluster Interactions. *Rep. Prog. Phys.*, 2008, Vol. 71, Iss. 4, p. 46501. DOI: 10.1088/0034-4885/71/4/046501
8. Mirzoev A.A., Yalalov M.M., Mirzaev D.A. Calculation of the Energy of Mixing for the Fe–Cr Alloys by the First-Principles Methods of Computer Simulation. *The Physics of Metals and Metallography*, 2004, Vol. 97, no. 4, pp. 336–341. (in Russ.). DOI: 10.1134/s0031918x06040065
9. Olsson P.; Abrikosov I.A.; Wallenius J. Electronic Origin of the Anomalous Stability of Fe-rich BCC Fe–Cr Alloys. *Physical Review B*, 2006, Vol. 73, Iss. 10, P. 104416–6. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.104416
10. Gorbатов O.I., Okatov S.V., Gornostyrev Y.N., Korzhavyi P.A., Ruban A.V. Effect of Magnetism on the Solubility of 3d Elements in BCC Iron: Results of First-Principle Investigations. *The Physics of Metals and Metallography*, 2013, Vol. 114, Iss. 8, pp. 642–653. DOI: 10.1134/S0031918X13080036
11. Andersson J.-O. A Thermodynamic Evaluation of the Iron–Vanadium System. *Calphad*, 1983, Vol. 7, Iss. 4, pp. 305–315. DOI: 10.1016/0364-5916(83)90010-X
12. Hari Kumar K.C., Raghavan V.A Thermodynamic Reassessment of the Fe–V System. *Calphad*, 1991, Vol. 15, Iss. 3, pp. 307–314. DOI: 10.1016/0364-5916(91)90008-8
13. Lee B.-J., Lee D.N. A Thermodynamic Study on the V–C and Fe–V Systems. *Calphad*, 1991, Vol. 15, Iss. 3, pp. 283–291. DOI: 10.1016/0364-5916(91)90006-6
14. Johnson D.D., Pinski F.J., Staunton J.B. The Slater–Pauling Curve: First Principles Calculations of the Moments of Fe_{1-c}Ni_c and V_{1-c}Fe_c. *Journal of Applied Physics*, 1987, Vol. 61, no. 8, pp. 3715–3717. DOI: 10.1063/1.338670
15. Rahman G., Kim I.G., Bhadeshia H.K.D.H., Freeman A.J. First-Principles Investigation of Magnetism and Electronic Structures of Substitutional 3d-Transition-Metal Impurities in BCC Fe. *Physical Review B*, 2010, Vol. 81, Iss. 18, P. 184423. DOI:10.1103/PhysRevB.81.184423
16. Krause J.C., Paduani C., Schaff J., da Costa, M.I., Jr. Electronic Structure of Disordered Fe–V Alloys. *Physical Review B*, 1998, Vol. 57, Iss. 2, pp. 857–861. DOI: 10.1103/physrevb.57.857
17. Gorbатов O.I., Okatov S.V., Gornostyrev Yu.N., Korzhavyi P.A., Ruban A.V. Effect of Magnetism on the Solubility of 3d Elements in BCC Iron: Results of First-Principle Investigations. *The Physics of Metals and Metallography*, 2013, Vol. 114, Iss. 8, P. 642–653. DOI: 10.1134/S0031918X13080036
18. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic Structure Calculations of Solids using the WIEN2k Package for Material Science. *Comp. Phys. Commun.*, 2002, Vol. 147, Iss. 1-2, pp. 71–76. DOI:10.1016/S0010-4655(02)00206-0
19. Sandman B., Agren J. A Regular Solution Model for Phase with Several Components and Sublattices, Suitable for Computer Applications. *J. of Phys. and Chem. of Solids.*, 1981, Vol. 42, Iss. 4, pp. 297–301. DOI: 10.1016/0022-3697(81)90144-X
20. Redlich O., Kister A.T. Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1948, Vol. 40, Iss. 2, pp. 345–348. DOI: 10.1021/ie50458a036
21. Smith J.F. The Fe–V (Iron–Vanadium) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1984, Vol. 5, pp. 184–194. DOI: 10.1007/BF02868958
22. Nevitt M.V., Aldred A.T. Ferromagnetism in V–Fe and Cr–Fe Alloys. *Journal of Applied Physics*, 1963, Vol. 34, Iss. 3, pp. 463–468. DOI:10.1063/1.1729295
23. Aldred A.T., Myles K.M. Thermodynamic Properties of Solid Vanadium-Iron Alloys. *J. Phys. Chem.*, 1964, Vol. 68, Iss. 1, pp. 64–69. DOI: 10.1021/j100783a012

Received August 22, 2023

Information about the authors

Mirzoev Aleksandr Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>, e-mail: mirzoevaa@susu.ru.

Verkhovikh Anastasiia Vladimirovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics of Nanoscale System Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: avverkhovikh@susu.ru.