

# ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 534.1

## РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТИ И СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫХ СМЕЩЕНИЙ ТВЕРДОГО РАСТВОРА NiAl ПО ФОНОННЫМ СПЕКТРАМ

Е.Ю. Краюшкина<sup>1</sup>, В.Е. Холодовский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Брянский государственный технический университет, Брянск, Российская Федерация

e-mail: senichenkova@mail.ru

<sup>2</sup>Брянский государственный университет, Брянск, Российская Федерация

e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

*С использованием ранее разработанной методики построена динамическая модель, учитывающая взаимодействия между атомами на первых двух координационных сферах, для кристалла NiAl, имеющего структуру типа CsCl. Исходя из экспериментальных данных по нейтронному рассеянию, выполнены расчеты дисперсионных кривых и упругих констант. Построены кривые плотности фононных состояний, а также рассчитан вклад каждой подрешетки в энергию колебаний кристалла. По этим данным определена зависимость среднеквадратичных смещений атомов каждой подрешетки и теплоемкости кристалла от температуры.*

**Ключевые слова:** кристаллическая решетка, динамическая модель, межатомное взаимодействие, дисперсионные кривые, упругие константы, фононный спектр, среднеквадратичное смещение, теплоемкость.

## THE HEAT CAPACITY AND MEAN-SQUARE DISPLACEMENTS OF THE SOLID SOLUTION NiAl OVER THE PHONON SPECTRUM

E.Yu. Krayushkina<sup>1</sup>, V.E. Holodovsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Bryansk State Technical University, Bryansk, Russian Federation

e-mail: senichenkova@mail.ru

<sup>2</sup>Bryansk State University, Bryansk, Russian Federation

e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

*The article presents the dynamic model based on the previously developed technique which considers an interaction between the atoms in the first two coordination spheres for a crystal NiAl with the structure of CsCl. It discusses calculations of the dispersion curves and elastic constants made with the help of experimental data of neutron scattering. The curves of the phonon density of states are built. Each sublattice contribution to the crystal oscillation energy was estimated. The relations between the mean-square atomic displacements of each sub lattice as well as the heat capacity of crystals and the temperature are found.*

**Keywords:** crystal lattice, dynamic model, interatomic interaction, dispersion curves, elastic constants, phonon spectrum, mean-square displacement, specific heat.

**Введение.** Упорядоченный твердый раствор NiAl широко используется в аэрокосмической промышленности, что связано с такими его уникальными свойствами, как высокая температура плавления

(1911 К), низкая плотность ( $5,85 \text{ г/см}^3$ ), а также стойкость к окислению [1]. Исследованию динамики решетки  $\beta\text{-NiAl}$  посвящены работы [2–4]. Экспериментальное исследование  $\text{NiAl}$  проведено в работе [2], методом неупругого рассеяния нейтронов были измерены кривые дисперсии фононов по основным направлениям симметрии, для описания результатов эксперимента использована модель Борна – Кармана с учетом трех и четырех ближайших соседей. Исходя из первых принципов с использованием метода линейного отклика и ультрамягких псевдопотенциалов в работе [3] были исследованы фононный спектр и фононная плотность состояний интерметаллидов  $\text{Ni}_3\text{Al}$  и  $\text{NiAl}$ . С учетом первых принципов в работе [4] также исследованы аномалии акустических ветвей по основным направлениям симметрии.

В настоящей статье кривые дисперсии фононов, полная и парциальная плотность фононных состояний были определены исходя из динамической модели, разработанной в работах [5–9], в которой для определения сил межатомного взаимодействия использовался механизм вандерваальсовых связей. По этим данным построены зависимости среднеквадратичных смещений атомов каждой подрешетки и теплоемкости кристалла от температуры.

**Методика расчета.** Кратко опишем основные положения используемой методики расчета (более подробно с методикой можно ознакомиться в работе [10]).

Рассмотрим бинарную кубическую кристаллическую решетку типа  $\text{CsCl}$ . Предположим, что в процессе колебаний атомов решетки в каждом из них находится внутриатомный диполь, одним из полюсов которого является остов атома, а другим — центр заряда его внешней электронной оболочки (ВЭО). Пусть  $\Lambda$  — множество всех числовых наборов  $\xi = (h, k, l)$ , в которых существуют числа  $1 \leq h, k, l \leq N$ , задающих положение узла кристаллической решетки. Обозначим через  $\mathbf{r}_\xi$  плечо дипольного момента атома  $A_\xi$ , наведенного в результате его относительного перемещения с соседними атомами из первой и второй координационных сфер.

На внутриатомный диполь атома  $A_\xi$  действует кулоновская сила  $\mathbf{Q}_\xi$  со стороны диполей остальных атомов решетки, в результате чего центр заряда ВЭО атома и плечо его дипольного момента получают некоторое приращение  $\Delta\mathbf{r}_\xi$ :  $\mathbf{P}_\xi = \mathbf{r}_\xi + \Delta\mathbf{r}_\xi$ .

Наведенный дополнительный дипольный момент создает частичное экранирование силы  $\mathbf{Q}_\xi$ , тогда внешняя сила, действующая на остов атома, становится равной:  $\mathbf{F}_\xi = \mathbf{Q}_\xi - (\beta/\alpha) \Delta\mathbf{r}_\xi$ , где  $\alpha$  — поляризуемость атома  $A_\xi$ ;  $\beta = q^2/(4\pi\epsilon_0)$ ,  $q$  — эффективный заряд диполя атома.

На остов атома  $A_\xi$  также действует сила реакции  $\mathbf{R}_\xi$  на излучение его внутриатомного диполя. В первом приближении эта сила пропорциональна плечу диполя [11]:  $\mathbf{R}_\xi = -(2\beta/(3r^3)) \mathbf{P}_\xi$ , где  $r$  — радиус сферы, плотность потока энергии излучения внутриатомного диполя через которую считается равным работе силы реакции за единицу времени.

Пусть  $\mathbf{u}_\xi$  — вектор смещения остова атома  $A_\xi$  из положения равновесия в момент времени  $t$ . Суммируя все силы, действующие на остов атома  $A_\xi$ , получаем уравнение его движения:  $\mu \ddot{\mathbf{u}}_\xi = \mathbf{F}_\xi + \mathbf{R}_\xi - (\beta/\alpha) \mathbf{p}_\xi$ .

В адиабатическом приближении на любом временном промежутке энергия, поглощаемая атомом, совпадает с энергией, излучаемой им. Это условие будет выполнено, если принять, что внешняя, частично экранированная кулоновская сила уравновешивается силой реакции:  $\mathbf{F}_\xi + \mathbf{R}_\xi = 0$ . Тогда в состоянии термодинамического равновесия уравнение движения остова атома  $A_\xi$  принимает вид:

$$\mu \ddot{\mathbf{u}}_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} \mathbf{p}_\xi. \quad (1)$$

Пусть  $A_\xi$  — атом первой или второй подрешетки,  $A_{\xi'}$  — атом, находящийся на первой или второй координационной сфере атома  $A_\xi$ ,  $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$  — единичный вектор, указывающий направление от узла  $D_\xi$  к узлу  $D_{\xi'}$ ,  $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$  — вектор относительного перемещения атомов  $A_\xi$  и  $A_{\xi'}$ ,  $\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \langle w_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}$ ,  $\mathbf{t}_{\xi\xi'} = \mathbf{w}_{\xi\xi'} - \mathbf{r}_{\xi\xi'}$  — радиальная и тангенциальная составляющие этого вектора. За плечо дипольного момента  $\mathbf{p}_\xi$ , наведенного в результате перемещения атома  $A_\xi^m$  относительно соседних атомов, примем линейную комбинацию векторов  $\mathbf{r}_{\xi\xi'}$  и  $\mathbf{t}_{\xi\xi'}$ . Тогда уравнение (1) движения атома  $A_\xi$  можно записать в виде

$$\mu \ddot{\mathbf{u}}_\xi = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} ((\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} \mathbf{w}_{\xi\xi'}) + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} ((\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t} \mathbf{w}_{\xi\xi'}). \quad (2)$$

Здесь  $\sigma_{1r}, \sigma_{1t}, \sigma_{2r}, \sigma_{2t}$  — некоторые константы, определяемые свойствами кристалла;  $S_l(\xi)$  — множество всех мультииндексов  $\xi' \in \Lambda$ , нумерующих атомы, находящиеся на  $l$ -й координационной сфере атома  $A_\xi$ .

Разделяя атомы кристалла по подрешеткам и используя верхние индексы, приходим к двум системам уравнений вида (2), описывающих колебания каждой подрешетки.

Решение полученных систем уравнений ищется в виде уравнений бегущих волн:  $\mathbf{u}_\xi^1(t) = \mathbf{v}^1 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^1 - \omega t)$ ,  $\mathbf{u}_\xi^2(t) = \mathbf{v}^2 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi^2 - \omega t)$ , где  $\mathbf{K} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$  — волновой вектор;  $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2$  — векторы поляризации;  $\omega$  — частота.

В результате приходим к системе

$$\begin{aligned}
 (a_x^1 - \mu_1 \omega^2)x_1 + b_x x_2 + b_z y_2 + b_y z_2 &= 0; \\
 (a_y^1 - \mu_1 \omega^2)y_1 + b_z x_2 + b_y y_2 + b_x z_2 &= 0; \\
 (a_z^1 - \mu_1 \omega^2)z_1 + b_y x_2 + b_x y_2 + b_z z_2 &= 0; \\
 (a_x^2 - \mu_2 \omega^2)x_2 + b_x x_1 + b_z y_1 + b_y z_1 &= 0; \\
 (a_y^2 - \mu_2 \omega^2)y_2 + b_z x_1 + b_y y_1 + b_x z_1 &= 0; \\
 (a_z^2 - \mu_2 \omega^2)z_2 + b_y x_1 + b_x y_1 + b_z z_1 &= 0,
 \end{aligned} \tag{3}$$

где  $x_1, y_1, z_1$  и  $x_2, y_2, z_2$  — координаты векторов поляризации. С точностью до круговой перестановки индексов коэффициенты системы (3) находятся по формулам

$$\begin{aligned}
 a_x^1 &= 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 \sin^2(k_x a/2) + 4\sigma_{2t}^1 (\sin^2(k_y a/2) + \sin^2(k_z a/2)); \\
 a_x^2 &= 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^2 \sin^2(k_x a/2) + 4\sigma_{2t}^2 (\sin^2(k_y a/2) + \sin^2(k_z a/2)); \\
 b_x &= 8\sigma_2 \cos(k_x a/2) \sin(k_y a/2) \sin(k_z a/2); \\
 b &= -8\sigma_1 \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2); \\
 \sigma_1 &= \frac{\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}}{3}; \quad \sigma_2 = \frac{\sigma_{1r} - \sigma_{1t}}{3},
 \end{aligned}$$

где  $a$  — параметр решетки.

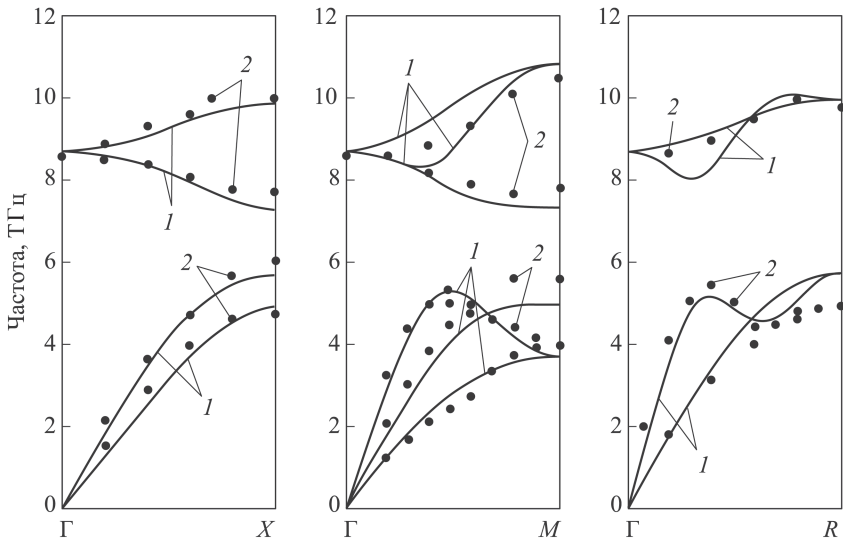
Для каждого разрешенного значения волнового вектора  $\mathbf{K}$  система (3) определяет частоты  $\omega_{K,j}$ ,  $j = 1, 2, 3, \dots, 6$ , трех акустических и трех оптических колебательных мод. Кроме того, для заданных значений  $K, j$  и вычисленной частоты  $\omega_{K,j}$  она позволяет однозначно определить векторы поляризации  $\mathbf{v}_1$  и  $\mathbf{v}_2$  так, чтобы выполнялось условие  $x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 + x_2^2 + y_2^2 + z_2^2 = 1$ .

**Результаты расчетов и обсуждения.** В случае, когда волновой вектор  $\mathbf{K}$  имеет одно из основных кристаллографических направлений система (3) приводит к дисперсионному соотношению:

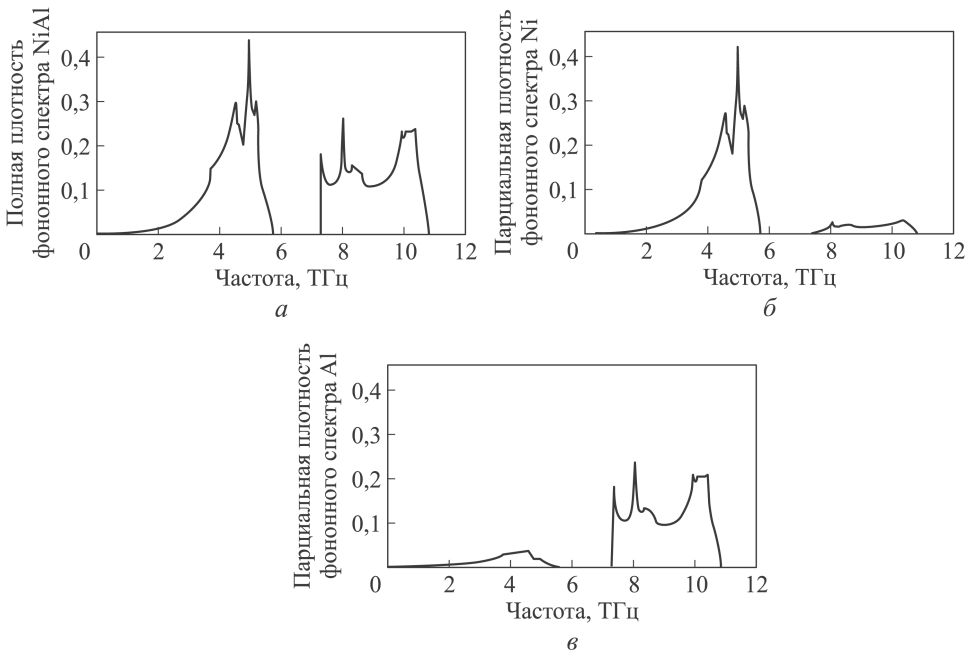
$$\omega^2 = \frac{A_2 \mu_1 + A_1 \mu_2}{2\mu_1 \mu_2} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1 \mu_2}{A_2 \mu_1 + A_1 \mu_2} (A_1 A_2 - B^2)} \right],$$

где  $A_1, A_2, B$  — некоторые величины, выражаемые через коэффициенты системы (3).

Результаты расчетов дисперсионных кривых по приведенным выше формулам, и экспериментальные значения, полученные методом неупругого рассеяния нейтронов и представленные в работе [2] для кристалла твердого раствора NiAl, показаны на рис. 1. Наблюдается хорошая согласованность расчетных и экспериментальных данных. Следует отметить, что оптические ветви в большей мере определяются колебаниями более легких атомов алюминия, а акустические — колебаниями атомов никеля ( $M_{\text{Ni}}/M_{\text{Al}} \approx 2$ ). Это также подтверждается кривыми парциальной плотности фононного спектра (рис. 2).



**Рис. 1.** Дисперсионные кривые (1), полученные по приведенным выше формулам, и экспериментальные значения (2), рассчитанные методом неупругого рассеяния нейтронов и взятые из работы [2] для кристалла твердого раствора NiAl при температуре 296 К



**Рис. 2.** Кривые полной (а) и парциальной (б, в) плотности фонных состояний для сплава NiAl

В континуальном приближении, когда выполняется условие  $Ka \ll 1$  справедливо неравенство  $A_1 A_2 - B^2 \ll 1$ . Поэтому можно полагать, что для акустических мод справедливо соотношение

$$\omega^2 = \frac{A_1 A_2 - B^2}{A_2 \mu_1 + A_1 \mu_2}. \quad (4)$$

Сравнивая соотношение (4) с дисперсионными соотношениями из теории упругости для основных кристаллографических направлений, приходим к равенствам

$$\begin{aligned} 2\sigma_1 + \sigma_{2t}^1 + \sigma_{2t}^2 &= aC_{44}; \\ 4\sigma_2 &= a(C_{12} + C_{44}); \\ \sigma_{2r}^1 + \sigma_{2r}^2 - \sigma_{2t}^1 - \sigma_{2t}^2 &= a(C_{11} - C_{44}). \end{aligned} \quad (5)$$

С помощью подобранных значений силовых констант по формулам (5) были вычислены значения упругих констант. При расчетах использовалось экспериментально определенное значение параметра решетки NiAl  $2,887 \text{ \AA}$  [1]. Результаты, полученные в настоящей работе, и результаты расчетов, выполненных другими авторами, представлены в таблице. Следует отметить, что в силу некоторых причин значения упругих констант существенно расходятся со значениями, определенными разными авторами, проводившими подобные исследования.

**Расчетные и экспериментальные значения упругих констант NiAl при комнатной температуре, а также значения этих констант, полученные другими авторами**

Упругая константа	Расчетные значения, полученные в настоящей работе	Экспериментальные значения [12]	Значения, взятые из работ			
			[2]	[13]	[14]	[15]
$C_{11}, (GPa)$	177	199	197	233	159,26	202,30
$C_{12}, (GPa)$	98	137	119	121	144,14	146,10
$C_{44}, (GPa)$	83	116	110	114	93,96	100,30

Полная энергия колебательной моды частотой  $\omega$  при температуре  $T$  определяется по формуле Планка  $E = \frac{1}{2} \hbar \omega \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right)$ . Согласно классическим представлениям, вклад в эту энергию каждой подрешетки пропорционален произведению  $\mu_m |\mathbf{v}^m|^2$ , и следовательно, произведению  $\mu_m g_{\mathbf{K},j}^m$ , где  $\mathbf{g}_{\mathbf{K},j}^1 = x_1^2 + y_1^2 + z_1^2$ ;  $g_{\mathbf{K},j}^2 = x_2^2 + y_2^2 + z_2^2$ . Таким образом, для заданных значений  $K$  и  $j$  вклад каждой подрешетки в полную энергию соответствующей моды описывается формулой

$$E_{\mathbf{K},j}^m = \frac{\mu_m g_{\mathbf{K},j}^m}{2(g_{\mathbf{K},j}^1 \mu_1 + g_{\mathbf{K},j}^2 \mu_2)} \hbar \omega_{\mathbf{K},j} \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar \omega_{\mathbf{K},j}}{2k_B T} \right).$$

Для расчета вклада каждой подрешетки в полную энергию кристалла удобно использовать понятие парциальной плотности фононного спектра  $D_m(\omega)$ :

$$D_m(\omega) = \frac{1}{6M\Delta\omega} \sum_{\mathbf{K},m} \frac{\mu_m g_{\mathbf{K},j}^m}{\mu_1 g_{\mathbf{K},j}^1 + \mu_2 g_{\mathbf{K},j}^2} \delta_{\Delta\omega}(\omega_{\mathbf{K},m} - \omega), \quad (6)$$

где  $M$  — число задаваемых значений вектора  $\mathbf{K}$ , равномерно распределенных в зоне Бриллюэна;  $\Delta\omega$  — условная единица длины фононного спектра;

$$\delta_{\Delta\omega}(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \in [-\Delta\omega/2, \Delta\omega/2]; \\ 0, & \text{если } x \notin [-\Delta\omega/2, \Delta\omega/2]. \end{cases}$$

Формула (6) позволяет рассчитать отдельные значения парциальной плотности фононного спектра в точках, равномерно распределенных по всему фононному спектру с шагом  $\Delta\omega$ .

Подобно классической формуле, выражающей температурную зависимость энергии кристаллической решетки, вклад каждой подрешетки в энергию одного моля выражается интегралом

$$E_m = \frac{3N_A}{2} \int_0^{\omega_{\max}} D_m(\omega) \hbar\omega \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) d\omega.$$

Аналогично, подобно классическим формулам, выражается вклад каждой подрешетки в теплоемкость кристалла, среднеквадратичные смещения атомов каждой подрешетки и другие характеристики, определяемые фононным спектром.

Кривые полной и парциальной плотности фононных состояний для NiAl приведены на рис. 2, а зависимость среднеквадратичного смещения атомов от температуры — на рис. 3. В настоящей работе также была рассчитана зависимость молярной теплоемкости  $c_V$  от температуры (рис. 4). Наблюдается хорошая согласованность полученных значений

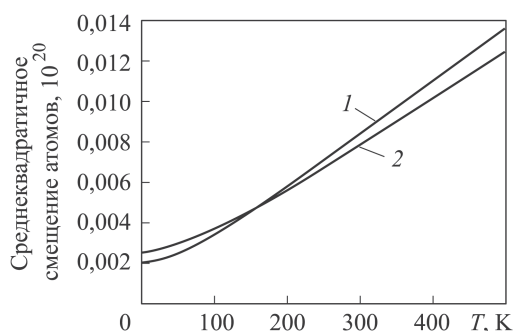


Рис. 3. Зависимость среднеквадратичного смещения атомов Ni (1) и Al (2) в сплаве NiAl от температуры

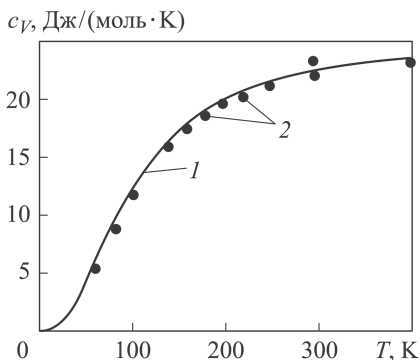


Рис. 4. Расчетная (1) и экспериментальная (2) зависимость молярной теплоемкости NiAl от температуры (экспериментальные данные взяты из работы [16])

теплоемкости с экспериментальными данными во всем исследуемом диапазоне значений температуры.

**Заключение.** Построенная динамическая модель позволила исходя из экспериментальных данных провести расчеты дисперсионных кривых, определить значения упругих констант для атомов интерметаллида NiAl, полную и парциальные плотности фононных состояний, а также зависимости среднеквадратичных смещений атомов каждой подрешетки и теплоемкости от температуры. Установленные результаты хорошо согласуются с данными, вычисленными другими авторами, и с экспериментальными значениями. Представленная модель дает возможность выполнить расчеты динамических и испускательных характеристик внутриатомных диполей рассматриваемого кристалла.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Miracle D.B.* The physical and mechanical properties of NiAl // *Acta metall, mater.* 1993. Vol. 41. No. 3. P. 649–684.
2. *Bulk and surface vibrational modes in NiAl* / M. Mostolle, R.M. Nicklow, D.M. Zehner, S.-C. Lui, J.M. Mundenar, E.W. Plummer // *Phys. Rev. B.* 1989. Vol. 40. No. 5. P. 2856.
3. *Фононные спектры Li<sub>2</sub>Ni<sub>3</sub>Al и В<sub>2</sub>NiAl: расчеты из первых принципов* / Э.И. Исаев, А.И. Лихтенштейн, Ю.Х. Векилов, Е.А. Смирнова // *Физика твердого тела.* 2004. Т. 46. Вып. 7. С. 1158–1164.
4. *Xiangyang Huang, Ivan I. Naumov, Karin M. Rabe.* Phonon anomalies and elastic constants of cubic NiAl from first principles // *Physical Review B.* 2004. Vol. 70. P. 064301.
5. *Холодовский В.Е., Мачихина И.О.* Принцип длинных волн и дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий // *Известия СамНЦ РАН. Сер. Физика и электроника.* 2009. № 11 (5). С. 49.
6. *Холодовский В.Е., Мачихина И.О., Кульченко Е.А.* Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий // *Вестник ЮУрГУ. Сер. Математика, физика, химия.* 2009. № 12 (10). С. 92.
7. *Холодовский В.Е., Мачихина И.О.* Принцип длинных волн и фононные спектры кубических кристаллических решеток // *Вестник ЮУрГУ. Сер. Математика. Механика. Физика.* 2009. № 1 (22). С. 109.
8. *Холодовский В.Е., Мачихина И.О., Кульченко Е.А.* Расчет теплоемкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК- и ГЦК-решеткой // *Вестник ЮУрГУ. Сер. Математика. Механика. Физика.* 2010. № 2 (9). С. 101.
9. *Мачихина И.О., Холодовский В.Е.* Расчет теплофизических свойств кристаллов инертных газов по упругим константам // *Известия СамНЦ РАН.* 2012. № 14 (4). С. 116.
10. *Холодовский В.Е., Краюшкина Е.Ю.* Дисперсионные соотношения для кристаллов твердых растворов со структурой CsCl // *Ученые записки Забайкальского государственного университета. Сер. Физика, математика, техника, технология.* 2013. № 3. С. 121.
11. *Холодовский В.Е., Сидоров А.А.* Поток энергии и сила реакции на излучение внутриатомного диполя // *Ученые записки Забайкальского государственного университета. Сер. Физика, математика, техника, технология.* 2012. № 3. С. 141.



12. *Rusovic N., Warlimont H.* The Elastic Behaviour of  $\beta_2$ -NiAl Alloys // *Phys. Status Solidi A.* 1977. Vol. 44. P. 609.
13. *Ponomareva A.V., Isaev Eyyas, Vekilov Yu. Kh., Abrikosov I.* Site preference and effect of alloying on elastic properties of ternary B2 NiAl-based alloys // *Physical Review B.* 2012. Vol. 85. P. 144117.
14. *First-principles* calculation on mechanical and thermal properties of B-NiAl with point defects (in Chinese) / Y.L. Lu, H.X. Hou, Z. Chen, et al. // *Sci Sin-Phys Mech Astron.* 2013. Vol. 43. P. 152.
15. *Fu Hongzhi, Li XiaoFeng, Liu WenFang, Mab Yanming, Gao Tao, Hong Xinhua.* Electronic and dynamical properties of NiAl studied from first principles. *Intermetallics*, 19, 1959 (2011).
16. *Desai P.D.* Thermodynamic Properties of Selected Binary Aluminum Alloy Systems // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1987. Vol. 16. No. 1.

## REFERENCES

- [1] Miracle D.B. The physical and mechanical properties of NiAl. *Acta metall mater.*, 1993, vol. 41, no. 3, pp. 649–684.
- [2] Mostolle M., Nicklow R.M., Zehner D.M., Lui S.-C., Mundenar J.M., Plummer E.W. Bulk and surface vibrational modes in NiAl. *Phys. Rev. B*, 1989, vol. 40, iss. 5, p. 2856.
- [3] Isayev E.I., Liechtenstein A.I., Vekilov Yu.H., Smirnova E.A. Phonon spectra of  $L1_2$  Ni<sub>3</sub>Al and  $B2$  NiAl: calculations from first principles. *Solid State Physics.* 2004, vol. 46, no. 7, pp. 1158–1164.
- [4] Huang X., Naumov I.I., Rabe K.M. Phonon anomalies and elastic constants of cubic NiAl from first principles. *Physical Review B*, 2004, vol. 70, pp. 064301.
- [5] Holodovsky V.E., Machikhina I.O. The principle of long waves and dispersion relations for the cubic crystal lattices in the model of dipole-dipole interactions. *Izvestiya SamNC RAN. Ser. Physics and Electronics*, 2009, vol. 11, no. 5, p. 49 (in Russ.).
- [6] Holodovsky V.E., Machihina I.O., Kulchenkov E.A. Dispersion relations for the cubic crystal lattices in the model dipole-dipole interactions. *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gos. Universiteta. Ser. "Matematika. Fizika. Khimiya"* [Herald YuUrGU. Ser. Mathematics, Physics, Chemistry], 2009, vol. 12, iss. 10, p. 92 (in Russ.).
- [7] Holodovsky V.E., Machihina I.O. Principle of long waves and phonon spectra of cubic crystalline lattices. *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gos. Universiteta. Ser. "Matematika. Mekhanika. Fizika"* [Herald YuUrGU. Ser. Mathematics. Mechanics. Physics,], 2009, vol. 12, iss. 10, p. 92 (in Russ.).
- [8] Holodovsky V.E., Machihina I.O., Kulchenkov E.A. The heat capacity and mean-square displacements on the phonon spectra of crystals with bcc and fcc lattice. *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gos. Universiteta. Ser. "Matematika. Mekhanika. Fizika"* [Herald YuUrGU. Ser. Mathematics. Mechanics. Physics], 2010, vol. 2, iss. 9, p. 101 (in Russ.).
- [9] Machihina I.O., Holodovsky V.E. Calculation of thermophysical properties crystals of inert gases on the elastic constants. *Izvestiya SamNC RAN*, 2012, vol. 14, no. 4, p. 116 (in Russ.).
- [10] Holodovsky V.E., Krayushkina E.Yu. Dispersion relations for crystals of solid solutions with the structure of CsCl. *Uchenye zapiski Zabaykal'skogo gos. universiteta* [Scientific notes of the Zabaikalsky State University. Ser. Physics, mathematics, engineering, technology], 2013, no. 3, p. 121 (in Russ.).
- [11] Holodovsky V.E., Sidorov A.A. The energy flux and the reaction force on the intra-dipole radiation. *Uchenye zapiski Zabaykal'skogo gos. universiteta* [Scientific notes of the Zabaikalsky State University. Ser. Physics, mathematics, engineering, technology], 2012, no. 3, p. 141 (in Russ.).

- [12] Rusovic N., Warlimont H. The Elastic Behaviour of  $\beta_2$ -NiAl Alloys. *Phys. Status Solidi A*, 1977, vol. 44, p. 609.
- [13] Ponomareva A.V., Isaev E.I., Vekilov Yu.H., Abrikosov I. Site preference and effect of alloying on elastic properties of ternary B2 NiAl-based alloys. *Physical Review B*, 2012, vol. 85, p. 144117.
- [14] Lu Y.L., Hou H.X, Chen Z., et al. First-principles calculation on mechanical and thermal properties of B-NiAl with point defects (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron.*, 2013, vol. 43, p. 152.
- [15] Hongzhi Fu, Xiao Feng Li, Wen Fang Liu, Yanming Mab, Tao Gao, Xinhua Hong. Electronic and dynamical properties of NiAl studied from first principles. *Intermetallics*, 2011, vol. 19, p. 1959.
- [16] Desai P.D. Thermodynamic Properties of Selected Binary Aluminum Alloy Systems. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1987, vol. 16, no. 1.

Статья поступила в редакцию 13.10.2014

Краюшкина Елена Юрьевна — старший преподаватель кафедры “Общая физика” Брянского государственного технического университета. Автор одной научной работы в области физики конденсированного состояния.

Брянский государственный технический университет, Российская Федерация, 241035, Брянск, бул. 50-летия Октября, д. 7.

Krayushkina E.Yu. — senior lecturer of General Physics department of the Bryansk State Technical University. Author of one publication in the field of condensed matter physics. Bryansk State Technical University, bul. 50-letiya Oktyabrya 7, Bryansk, 241035 Russian Federation.

Холодовский Владимир Евгеньевич — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Математический анализ” Брянского государственного университета. Автор 46 научных работ в области физики конденсированного состояния, прикладной математики.

Брянский государственный университет, Российская Федерация, 241036, Брянск, Бежицкая ул., д. 14.

Holodovsky V.E. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Mathematical Analysis” department of the Bryansk State University. Author of 46 publications in the field of condensed matter physics, applied mathematics.

Bryansk State University, Bezhitskaya ul. 14, Bryansk, 241036 Russian Federation.

#### **Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Краюшкина Е.Ю., Холодовский В.Е. Расчет теплоемкости и среднеквадратичных смещений твердого раствора NiAl по фоновым спектрам // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 3. С. 110–119.

#### **Please cite this article in English as:**

Krayushkina E.Yu., Holodovsky V.E. The heat capacity and mean-square displacements of the solid solution NiAl over the phonon spectrum. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2015, no. 3, pp. 110–119.