

DOI:

УДК 536.425:538.91

**Б.Б. Хина**, д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник, khina@tut.by

Физико-технический институт НАН Беларуси, г. Минск

**Г.Г. Горанский**, к.т.н., ведущий научный сотрудник, georggoran@rambler.ru

Научно-технологический парк “Политехник”, Белорусский Национальный технический университет, г. Минск

**Б.П. Середа**, д.т.н., профессор

Днепропетровский государственный технический университет, г. Каменское

## АНАЛИЗ ПРИМЕНИМОСТИ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МИЕДЕМЫ К ОПИСАНИЮ ПАРЦИАЛЬНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОКОМПОНЕНТНОГО АМОРФНОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

*С использованием полуэмпирической модели Миедемы и понятия избыточной энтропии смешения рассчитаны парциальные термодинамические характеристики железа (основы сплава) для аморфной фазы системы Fe – Si – B – Ni, полученной атриторной обработкой распыленного порошка сплава. Установлено, что теоретические результаты существенно отличаются от данных, определенных на основе электрохимических измерений при комнатной температуре. Показано, что модель Миедемы, которая широко применяется для оценки интегральной энтальпии аморфных фаз, не годится для оценки их парциальных термодинамических характеристик. Тем самым показано, что разработанный авторами ранее экспериментально-теоретический метод определения химического потенциала и парциальной молярной энтальпии компонентов может быть использован для оценки запасенной в аморфной фазе энергии пластической деформации.*

**Ключевые слова:** аморфный сплав; полуэмпирическая модель Миедемы; избыточная энтропия смешения; химический потенциал; парциальная молярная энтальпия.

*Partial thermodynamic characteristics of iron (the alloy base) of the amorphous phase in system Fe – Si – B – Ni, which was produced by attritor processing of atomized alloy powder, have been calculated using semiempirical Miedema model and the notion of excess entropy of mixing. It is established that the theoretical results differ substantially from the data that were obtained on the basis of electrochemical measurements at a room temperature. It is demonstrated that the Miedema model, which is widely used for estimating integral enthalpy of amorphous phases, is not suitable for assessing their partial thermodynamic characteristics. Thereby it is shown that the experimental-theoretical method for determining the chemical potential and partial molar enthalpy of components of an amorphous alloy, which was earlier developed by the authors, can be used for estimating the stored energy of plastic deformation in amorphous phase.*

**Keywords:** amorphous alloy; semiempirical Miedema model; excess entropy of mixing; chemical potential; partial molar enthalpy.

### Постановка проблемы

Разработать экспериментально-теоретический метод определения химического потенциала и парциальной молярной энтальпии компонентов для оценки запасенной в аморфной фазе энергии пластической деформации.

### Анализ последних исследований и публикаций

Аморфные сплавы, или металлические стекла получают путем быстрого охлаждения (закалки) металлического расплава с составом, близким к эвтектическому, а также методами механического легирования порошков исходных компонентов (чистых элементов или химических соединений) или интенсивного размолла порошков сплавов, имеющих необходимый состав, в различных устройствах (вибрационных и планетарных шаровых мельницах, атриторах) [1]. Аморфные сплавы обладают уникальными свойствами, в частности, высокой и стабильной упругостью, коррозионной стойкостью, гладкой поверхностью и, вследствие этого, низким ко-

эффицентом трения и высокой износостойкостью. Они широко используются в качестве материалов и покрытий для работы в условиях, где традиционные кристаллические сплавы уступают им по показателям износостойкости, упругости и электрофизическим свойствам [2]. В последние годы возрос интерес к получению и применению многокомпонентных аморфных сплавов на основе железа как более дешевым по сравнению с традиционными сплавами на основе никеля [3].

В предыдущей статье [4] авторами выполнено электрохимическое исследование и разработан теоретический метод определения химического потенциала и парциальной молярной энтальпии железа (основы сплава) в четырехкомпонентном аморфном сплаве системы  $Fe - Si - B - Ni$ , полученном путем распыления расплава с последующей атриторной обработкой (АО) для достижения полной аморфизации. Поскольку сплав подвергался интенсивной пластической деформации при АО, полученные характеристики связаны с запасенной в аморфной фазе энергией деформации.

Следует отметить, что в последние годы в ведущих научных центрах проводятся исследования влияния пластической деформации на физические, механические и термодинамические свойства металлических стекол [5] и при этом отмечается, что механизм этого влияния остается непонятным. В связи с этим предложенный нами подход [4] открывает возможность на основе электрохимических измерений получить парциальные термодинамические характеристики компонентов аморфной фазы, которые могут непосредственно зависеть от деформации и, соответственно, от атомно-кластерной структуры металлического стекла. При этом возникает необходимость сравнить полученные результаты с предсказаниями существующих теорий аморфного состояния.

#### Формулировка цели исследования

В настоящее время известна полуэмпирическая модель Миеды, позволяющая оценить энтальпию аморфных фаз, а также кристаллических соединений, для которых в литературе отсутствуют термодинамические данные. В зарубежной литературе она широко используется для анализа способности переохлажденных расплавов к аморфизации при быстром охлаждении [6]. Однако ранее эта модель не применялась для оценки химического потенциала компонентов аморфных фаз. В связи с этим целью данной работы является определение парциальных молярных величин железа (основы сплава) в многокомпонентной аморфной фазе на основе комбинации модели Миеды с CALPHAD-подходом, сравнение полученных ранее данных [4] с результатами расчетов, и оценка применимости этой модели для определения парциальных молярных величин компонентов аморфных фаз.

#### Изложение основного материала

В работе [4] на основе электрохимических измерений и теоретических расчетов получены значения химического потенциала и парциальной молярной энтальпии железа (основы сплава) для аморфной фазы состава  $Fe - 7,3\% Si - 14,2\% B - 8,26\% Ni$  (% масс.) при комнатной температуре  $T = 298$  К:  $\mu_{Fe} = 190,41$  Дж/моль,  $h_{Fe} = 15,807$  кДж/моль.

Для теоретических исследований будем использовать CALPHAD-подход (Calculation of Phase Diagrams — расчет диаграмм состояния), который широко применяется в современном материаловедении, и полуэмпирическую модель Миеды.

В CALPHAD-подходе [7] энергия Гиббса  $G_\varphi$  и энтальпия  $H_\varphi$  многокомпонентной фазы  $\varphi$  (расплава или неупорядоченного твердого раствора) определяются в виде

$$G_\varphi = \sum_{i=1}^k x_i G_i^\varphi + H_{ex} - TS_\varphi, \quad H_\varphi = \sum_{i=1}^k x_i H_i^\varphi + H_{ex}, \quad (1)$$

где  $x_i$  — мольная доля  $i$ -го компонента,  $G_i^\varphi$ ,  $H_i^\varphi$  — энергия Гиббса и энтальпия  $i$ -го компонента в фазовом состоянии  $\varphi$ ,  $H_{ex}$  — избыточная энтальпия смешения, связанная с химическим взаимодействием атомов разных сортов в данной фазе,  $S_\varphi$  — энтропия фазы  $\varphi$ ,  $T$  — температура,  $k$  — число компонентов (здесь  $k = 4$ ).

Для аморфних фаз стандартним состоянием для ее компонентов является жидкое ( $l$ ) [8], т.е.  $G_i^{\varphi} \equiv G_i^l$ ,  $H_i^{\varphi} \equiv H_i^l$ . Величины  $G_i^l$  и  $H_i^l$ ,  $i \equiv Fe, Si, B, Ni$ , можно рассчитать на основе параметров, приведенных в базе данных (БД) SGTE для широких интервалов температуры [9].

В аморфных фазах, в отличие от кристаллических, наряду с идеальной, или конфигурационной энтропией смешения  $S_{id}$ , связанной с хаотичным расположением атомов разных сортов, существует избыточная энтропия  $S_{\sigma}$ , которая связана с различием атомных диаметров  $d_i$  [10]. Тогда выражение для энтропии аморфной фазы  $\varphi \equiv am$  запишется в виде

$$S_{am} = \sum_{i=1}^k x_i S_i^l + S_{\sigma} + S_{id}, \quad S_{id} = -R \sum_{i=1}^k x_i \ln x_i, \quad (2)$$

где  $S_i^l$  — энтропия  $i$ -го компонента в жидком состоянии (стандартное состояние для аморфных фаз), которая определяется по данным БД SGTE [9],  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Величина  $S_{\sigma}$  определяется по следующим формулам [10]:

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{\sigma} = R \left\{ 1.5(\zeta^2 - 1)y_1 + 1.5(\zeta - 1)^2 y_2 - [(\zeta - 1)(\zeta - 3)/2 + \ln \zeta](1 - y_3) \right\}, \\ y_1 = (1/\sigma_3) \sum_{j \geq i=1}^k (d_i + d_j)(d_i - d_j)^2 x_i x_j, \quad y_2 = (\sigma_2/\sigma_3^2) \sum_{j \geq i=1}^k d_i d_j (d_i - d_j)^2 x_i x_j, \\ y_3 = \sigma_2^3/\sigma_3^2, \quad \sigma_n = \sum_{i=1}^k x_i d_i^n, \quad i \neq j, \quad n = 2, 3, \end{array} \right. \quad (3)$$

где численный коэффициент  $\zeta$  вычисляется как  $\zeta = 1/(1 - \xi)$ ,  $\xi = 0.64$ .

Химический потенциал железа  $\mu_{Fe}$  и его парциальная молярная энтальпия  $h_{Fe}$  в аморфной фазе выражается в виде

$$\mu_{Fe} = h_{Fe} - T s_{Fe}, \quad h_{Fe} = h_{Fe}^0 + h_{Fe}^{(ex)}, \quad (4)$$

где  $h_{Fe}^0 \equiv G_{Fe}^l$  — энтальпия железа в стандартном состоянии для этой фазы,  $h_{Fe}^{(ex)}$  — избыточная парциальная энтальпия смешения железа в аморфной фазе,  $s_{Fe}$  — его парциальная молярная энтропия. Последняя определяется как

$$s_{Fe} = s_{Fe}^0 + s_{\sigma, Fe} + s_{id, Fe}, \quad s_{id, Fe} = -R \ln x_{Fe}, \quad (5)$$

где  $s_{Fe}^0 \equiv S_{Fe}^l$  — энтропия железа в стандартном состоянии для этой фазы,  $s_{id, Fe}$  и  $s_{\sigma, Fe}$  — идеальная (конфигурационная) и избыточная парциальная молярная энтропия железа, соответственно.

Парциальные величины, входящие в формулы (4) и (5), можно определить из фундаментального соотношения, связывающего интегральные термодинамические величины  $Z$ ,  $Z \equiv G, H, H_{ex}, S_{\sigma}$  с парциальными  $z$ ,  $z \equiv \mu_{Fe}, h_{Fe}, h_{Fe}^{(ex)}, s_{Fe}, s_{\sigma, Fe}$ :

$$z_i = Z + \sum_{j=2}^k (\delta_{ij} - x_j) \frac{\partial Z}{\partial x_j}, \quad i = 1, \dots, k, \quad (6)$$

где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера ( $\delta_{ij}=1$  при  $i=j$ ,  $\delta_{ij}=0$  при  $i \neq j$ );  $i=1$  соответствует основе сплава ( $Fe$ ).

Для дальнейших расчетов необходимо определить избыточную энтальпию смешения для аморфной фазы  $H_{ex}$ , входящую в формулу (1).

Полуэмпирическая модель Миедымы [11] позволяет оценить изменение энтальпии  $\Delta H_{chem}$  при образовании фазы из элементов. Эта величина имеет смысл избыточной энтальпии смешения в аморфной фазе:

$$\Delta H_{chem} \equiv H_{ex} = \sum_{j>i=1}^k x_i x_j (x_j^s \Delta H_{i in j}^{chem} + x_i^s \Delta H_{j in i}^{chem}) f_{ij}, \quad (7)$$

где  $x_i^s$  — концентрация атомов  $i$ -го сорта на границе ячеек Вигнера-Зейца,  $\Delta H_{i \text{ in } j}^{\text{chem}}$  — энтальпия растворения  $i$ -го элемента в  $j$ -ом,  $i \neq j$ .

Для каждой пары элементов  $i$ - $j$  значения  $x_i^s$  и  $x_j^s$  определяются как

$$x_i^s = x_i V_i^{2/3} / (x_i V_i^{2/3} + x_j V_j^{2/3}), \quad x_j^s = 1 - x_i^s, \quad (8)$$

где  $V_i$  — молярный объем  $i$ -го элемента, откорректированный с учетом типа кристаллической решетки [11], а параметр  $f_{ij}$  имеет вид

$$f_{ij} = 1 + \gamma (x_i^s + x_j^s)^2, \quad (9)$$

где множитель  $\gamma = 5$  для аморфных тел.

Входящие в формулы (7) величины  $\Delta H_{i \text{ in } j}^{\text{chem}}$  определяются в виде [11]

$$\Delta H_{i \text{ in } j}^{\text{chem}} = \frac{2P_{ij}V_i^{2/3}}{n_i^{-1/3} + n_j^{-1/3}} \left[ -(\varphi_i^* - \varphi_j^*)^2 e + \frac{Q}{P_{ij}} (n_i^{1/3} - n_j^{1/3})^2 - \frac{R}{P_{ij}} \right]. \quad (10)$$

В выражении (10)  $e$  — элементарный электрический заряд,  $\varphi_i^*$  — параметр электроотрицательности для  $i$ -го компонента,  $n_i$  — параметр электронной плотности на границе ячейки Вигнера-Зейца,  $P_{ij}$  и  $R/P_{ij}$  — численные параметры, зависящие от природы пары элементов  $i$ - $j$ , величина  $Q/P_{ij} = 9,4$  для всех веществ. Значения величин, входящих в формулу (10) для всех рассматриваемых компонентов аморфной фазы приведены в работе [11]. Отметим что параметр  $e$  в формуле (10) записан только для соблюдения баланса размерностей, и его значение равно единице. В формуле (10)  $\Delta H_{i \text{ in } j}^{\text{chem}}$  имеет размерность эВ (электрон-вольт), и для пересчета в Дж/моль необходимо использовать переводной коэффициент:  $1 \text{ Дж/моль} = 1,6021 \cdot 10^{-19} N_A \text{ эВ}$ , где  $N_A$  — число Авогадро.

Результаты численных расчетов химического потенциала и парциальной молярной энтальпии железа (основы сплава) в четырехкомпонентной аморфной фазе по формулам (1)—(10) для интервала температуры, в котором аморфная фаза устойчива, приведены на рис. 1. В качестве размеров атомов  $d_i$ , входящих в выражения (3), нами использованы их диаметры по Гольдшмидту, взятые из [12]. Для сравнения показаны значения  $\mu_{Fe}$  и  $h_{Fe}$ , определенные нами ранее на основе электрохимических измерений и разработанного метода расчета [4].

На рис. 1 видно, что для комнатной температуры значения химического потенциала (пересечение сплошной линии с вертикальной осью) и парциальной молярной энтальпии железа (пересечение пунктирной линии с вертикальной осью), которые рассчитаны по модели Миеды для аморфного сплава указанного выше состава, существенно отличаются от значений, определенных на основе экспериментальных данных (см. значки на вертикальной оси).

Это связано с тем, что полуэмпирическая модель Миеды предназначена для оценки только интегральной величины (избыточной энтальпии смешения в аморфной фазе), и в силу

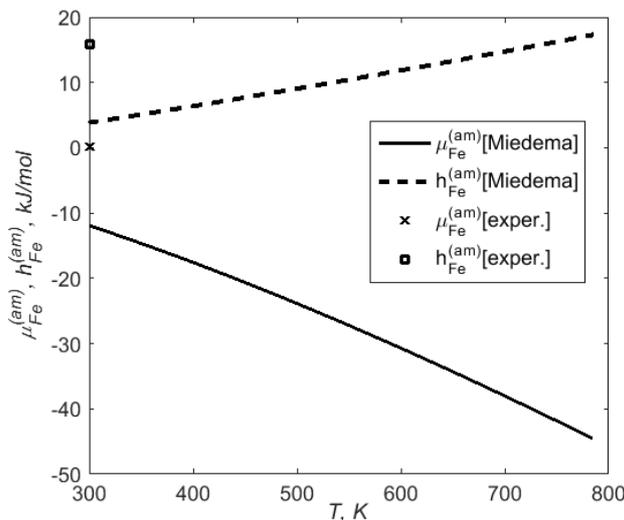


Рис. 1. Температурные зависимости химического потенциала и парциальной молярной энтальпии, рассчитанные на основе модели Миеды [Miedema]. Для сравнения показаны значения при комнатной температуре ( $T=298 \text{ K}$ ), определенные ранее [4] на основе экспериментальных измерений [exper.]

своей структуры не годится для оценки парциальных молярных величин.

Кроме того, поскольку аморфный сплав был получен путем АО, то определенные на основе эксперимента величины  $\mu_{Fe}$  и  $h_{Fe}$  [4] включают запасенную энергию деформации, приходящуюся на долю  $Fe$  (основы сплава). В модели Миедемы вклад запасенной энергии деформации не учитывается.

### Выводы

Таким образом, в данной работе впервые теоретически показано, что полуэмпирическая модель Миедемы, которая широко используется для оценки энтальпии образования аморфных фаз из элементов и предсказания области составов, где возможно получение металлических стекол при быстром охлаждении расплава, не годится для оценки парциальных термодинамических характеристик (химического потенциала и парциальной молярной энтальпии) компонентов аморфных сплавов. Это связано со структурой самой модели Миедемы. Кроме того, эта модель не учитывает запасенную энергию пластической деформации для аморфных сплавов, получаемых путем механолегирования или механического размолва в порошковых системах. Разработка новых термодинамических моделей аморфных тел для физически корректного описания их парциальных молярных характеристик представляет собой весьма сложную задачу и требует дальнейших исследований.

Из проведенных расчетов также следует, что разработанный в первой части работы [4] экспериментально-теоретический метод определения парциальных молярных характеристик компонентов аморфных фаз, основанный на электрохимических измерениях, позволяет не только связать эти параметры с атомно-кластерной структурой металлического стекла, но может служить основой для оценки величины запасенной в аморфной фазе энергии пластической деформации. Последнее особенно важно в связи с недавними исследованиями [5], которые показали, что пластическая деформация и ползучесть металлических стекол под действием постоянных напряжений позволяют существенно изменять их физические свойства.

### Список использованной литературы

1. Suryanarayana C., Inoue A. Bulk metallic glasses / C. Suryanarayana, A. Inoue. – Boca Raton, FL : CRC Press, 2011. – 523 p.
2. Kovalenko N. P., Krasny Yu. P., Krey U. Physics of amorphous metals / N. P. Kovalenko, Yu. P. Krasny, U. Krey. – Berlin : Wiley-VCH, 2001. – 280 p.
3. Stoica M. Fe-based bulk metallic glasses: understanding the influence of impurities on glass formation / M. Stoica. – Wiesbaden : Springer, 2017. – 126 p.
4. Горанский Г. Г., Хина Б. Б. Анализ термодинамических характеристик многокомпонентного аморфного сплава на основе железа: экспериментальное исследование и теоретическая интерпретация / Г. Г. Горанский, Б. Б. Хина // Математическое моделирование. – 2018. – С. 201-205.
5. Greer A. L., Sun Y. H. Stored energy in metallic glasses due to strains within the elastic limit / A. L. Greer, Y. H. Sun // Philosophical Magazine. – 2016. – V. 96. – P. 1643–1663.
6. Gallego L. J., Somoza J. A., Alonso J. A. Glass formation in ternary transition metal alloys / L. J. Gallego, J. A. Somoza, J. A. Alonso // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1990. – V. 2. – P. 6245–6250.
7. Lukas H. L., Fries S. G., Sundman B. Computational Thermodynamics: The Calphad Method / H. L. Lukas, S. G. Fries, B. Sundman. – Cambridge : Cambridge University Press, 2007. – 313 p.
8. Van der Kolk G. J., Miedema A. R., Niessen A. K. On the composition range of amorphous binary transition metal alloys / G. J. Van der Kolk, A. R. Miedema, A. K. Niessen // Journal of Less-Common Metals. – 1988. – V. 145. – P. 1–17.
9. Dinsdale A. T. SGTE data for pure elements / A. T. Dinsdale // Calphad. – 1991. – V. 15. – P. 317–425.
10. Takeuchi A., Inoue A. Calculations of mixing enthalpy and mismatch entropy for ternary amorphous alloys / A. Takeuchi, A. Inoue // Materials Transactions JIM. – 2000. – V. 41. – P. 1372–1378.

11. Miedema A. R., de Chatel P. F., de Boer F. R. Cohesion in alloys – fundamentals of a semi-empirical model / A. R. Miedema, P. F. de Chatel, F. R. de Boer // *Physica B.* – 1980. – V. 100. – P. 1–28.
12. *Smithells Metals Reference Book*, 8th Edition [eds. W. F. Gale, T. C. Totemeier]. – Amsterdam : Elsevier Inc., 2004. – 2072 p.

### **APPLICABILITY ANALYSIS OF THE SEMIEMPIRICAL MIEDEMA MODEL TO THE DESCRIPTION OF PARTIAL THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF A MULTICOMPONENT AMORPHOUS IRON-BASE ALLOY**

**Khina B.B., Goranskiy G.G., Sereda B.P.**

#### **Abstract**

The paper is devoted to the theoretical analysis of partial thermodynamic characteristics of the base component (here iron) of a multicomponent amorphous alloy using the CALPHAD approach, the concept of the excess entropy of mixing, and semi-empirical Miedema model.

The research goal is to verify the applicability of the semi-empirical Miedema model, which is used for estimating the enthalpy of mixing of amorphous phases and the compounds whose formation enthalpy is not known in literature, to calculating the partial thermodynamic parameters of the components of an amorphous alloy, such as chemical potential and partial molar enthalpy.

The research object is a quaternary amorphous alloy with composition Fe–7,3% Si–14,2% B–8,26% Ni (wt.%), which was developed at the Technological park “Polytechnic” of the Belorussian National Technical University; the alloy was produced by melt atomization with subsequent processing in an attritor to attain complete amorphization.

A method is developed for calculating the chemical potential and partial molar enthalpy of the alloy base (iron) in the amorphous phase using the Miedema model. The results of calculations are compared with the data obtained in the previous work by the authors, where the values of the aforesaid parameters for quaternary amorphous alloy were determined on the basis of electrochemical measurements at a room temperature.

Computer calculations have shown that the theoretical results differ substantially from the experimental data. It is demonstrated that the Miedema model, which is widely used for estimating integral enthalpy of amorphous phases, is not suitable for assessing their partial thermodynamic characteristics. This is connected with the structure of the semi-empirical Miedema model, which is intended for the estimation of integral enthalpy of mixing. Besides, it does not take into account the deformation energy stored in an amorphous phase during intensive periodic plastic deformation. Thereby it is shown that the experimental-theoretical method for determining the chemical potential and partial molar enthalpy of components of an amorphous alloy, which was earlier developed by the authors, can be used for estimating the stored energy of plastic deformation in amorphous phase.

#### **References**

- [1] Suryanarayana C. and Inoue A. *Bulk Metallic Glasses*. Boca Raton, FL: CRC Press, 2011. 523 p.
- [2] Kovalenko N.P., Krasny Yu.P., and Krey U. *Physics of Amorphous Metals*. Berlin: Wiley-VCH, 2001. 280 p.
- [3] Stoica M. *Fe-based Bulk Metallic Glasses: Understanding the Influence of Impurities on Glass Formation*. Wiesbaden: Springer, 2017. 126 p.
- [4] Goranskiy G.G. and Khina B.B. *Analiz termodinamicheskikh harakteristik mnogokomponentnogo amorfnogo splava na osnove zheleza: eksperimental'noe issledovanije i teoreticheskaya interpretatsiya* [Analysis of thermodynamic characteristics of a multicomponent amorphous iron-base alloy: experimental study and theoretical interpretation]. *Matematicheskoe modelirovanie – Mathematical Modeling*, 2018, 248 p. (in Russian).

- 
- [5] Greer A.L. and Sun Y.H. “Stored energy in metallic glasses due to strains within the elastic limit,” *Philosophical Magazine*, 2016, vol. 96, pp. 1643-1663. doi: 10.1080/14786435.2016.1177231
- [6] Gallego L.J., Somoza J.A., and Alonso J.A. “Glass formation in ternary transition metal alloys,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1990, vol. 2, pp. 6245-6250. doi: 10.1088/0953-8984/2/29/001
- [7] Lukas H.L. Fries S.G., and Sundman B. *Computational Thermodynamics: The Calphad Method*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. 313 p.
- [8] Van der Kolk G.J., Miedema A.R., and Niessen A.K. “On the composition range of amorphous binary transition metal alloys,” *Journal of Less-Common Metals*, 1988, vol. 145, pp. 1-17. doi: 10.1016/0022-5088(88)90257-3.
- [9] Dinsdale A. T. SGTE data for pure elements / A. T. Dinsdale // *Calphad*. – 1991. –V. 15. – P. 317–425.
- [10] Takeuchi A., Inoue A. Calculations of mixing enthalpy and mismatch entropy for ternary amorphous alloys / A. Takeuchi, A. Inoue // *Materials Transactions JIM*. – 2000. – V. 41. – P. 1372–1378.
- [11] Miedema A. R., de Chatel P. F., de Boer F. R. Cohesion in alloys – fundamentals of a semi-empirical model / A. R. Miedema, P. F. de Chatel, F. R. de Boer // *Physica B*. – 1980. – V. 100. – P. 1–28.
- [12] *Smithells Metals Reference Book*, 8th Edition [eds. W. F. Gale, T. C. Totemeier]. – Amsterdam : Elsevier Inc., 2004. – 2072 p.