

RESUMEN

En el presente trabajo se ha investigado la termodinámica de las fases β , β' y ξ° del sistema Ag-Zn mediante medidas de calor específico y de resistividad eléctrica. El trabajo se refiere principalmente a la aleación equiatómica.

Los resultados más significantes obtenidos son:

(i) La temperatura crítica de orden para la transformación β/β' en el 50 % at. ($T_c = 503$ °K).

(ii) Las temperaturas de Debye promedio ($\theta_{\beta'AgZn} = 185$ °K, $\theta_{\xi^{\circ}AgZn} = 225$ °K).

(iii) ξ° AgZn tiene una entropía residual a 0 °K ($S_c^{\xi^{\circ}}(0^{\circ}K) = 0.65$ R).

(iv) Por encima de 300 °K, ξ° AgZn presenta un calor específico anómalo. De acuerdo al diagrama de fases, 544 °K es la temperatura de equilibrio $\beta \rightleftharpoons \xi^{\circ}$, y a esa temperatura dicha anomalía representa una contribución a la entropía de 0.24 R.

Usando estos resultados se construye la diferencia de energía libre $\Delta G^{\beta\beta' \rightarrow \xi^{\circ}} = G^{\xi^{\circ}} - G^{\beta\beta'}$ entre 0 y 550 °K. $\beta'AgZn$ resulta estable entre 0 y 270 °K, ξ° entre 270 y 544 °K y β por encima de 544 °K. El error en la temperatura de equilibrio a 270 °K es estimado en ± 35 °K.

Las contribuciones electrónica, vibracional y configuracional a la estabilidad de las diferentes fases son analizadas y comparadas con las predicciones de la teoría de aleaciones. Se concluye que :

(i) El modo de deformación de Zener (una cizalladura en la dirección $[\bar{1}\bar{1}0]$ en el plano (110) de la red c.c.) es muy importante en la estabilidad de la estructura c.c. de AgZn, a 0 °K a través de la energía de punto cero, y a altas temperaturas a través de la entropía vibracional.

(ii) La reacción de orden-desorden β/β' también contribuye a la estabilización de la fase β a altas temperaturas.

(iii) La superficie de Fermi en β' AgZn es prácticamente esférica, y el mecanismo de Jones parece ser importante no sólo en la estabilidad de la fase β sino también en la de las fases β' y ξ^0 .

ABSTRACT

In the present work the thermodynamics of the β , β' and ξ^0 phases in the Ag-Zn system has been investigated by measuring the specific heat and electrical resistivity. The work is mainly concerned with the equiatomic alloy.

The most significant results obtained are:

(i) The critical temperature for order in the β/β' transformation at 50 % at. concentration ($T_c = 503$ °K).

(ii) The average Debye temperatures ($\Theta_{\beta'AgZn} = 185$ °K, $\Theta_{\xi^0AgZn} = 225$ °K).

(iii) ξ^0 AgZn has a residual entropy at 0 °K ($S_c^{\xi^0}(0 \text{ °K}) = 0.65$ R).

(iv) Above 300 °K, ζ^0 AgZn presents an anomalous specific heat. According to the phase diagram 544 °K is the equilibrium $\beta \rightleftharpoons \zeta^0$ temperature, and at this temperature this anomaly represents an entropy contribution of 0.24 R.

Using these results the free energy difference $\Delta G^{\beta\beta' \rightarrow \zeta^0} = G^{\zeta^0} - G^{\beta\beta'}$ is constructed between 0 and 550 °K. β' AgZn is found to be stable between 0 and 270 °K, ζ^0 between 270 and 544 °K and β above 544 °K. The error in the equilibrium temperature at 270 °K is estimated to be ± 35 °K.

The electronic, vibrational and configurational contributions to the stability of the different phases are analyzed and compared with the predictions of alloy theories. It is concluded that:

(i) The mode of deformation due to Zener (a shear in the $[1\bar{1}0]$ direction on the (110) plane in a b.c.c. lattice) is of major importance in the stability of b.c.c. AgZn, at 0 °K through the zero-point energy, and at high temperatures through the vibrational entropy.

(ii) The order-disorder reaction. β / β' also contributes to the stabilization of the β phase at high temperatures.

(iii) The Fermi surface in β' AgZn is very nearly spherical, and the mechanism of stabilization due to Jones seems to be important not only in the β phase but also in β' and ζ^0 .