

Особенности электронной структуры интерметаллида Co_3Ti в состоянии атомного беспорядка

© И.А. Нечаев, А.В. Дубовик, В.И. Симаков, В.С. Демиденко

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова при Томском государственном университете, 634050 Томск, Россия

(Поступила в Редакцию 24 октября 1996 г.)

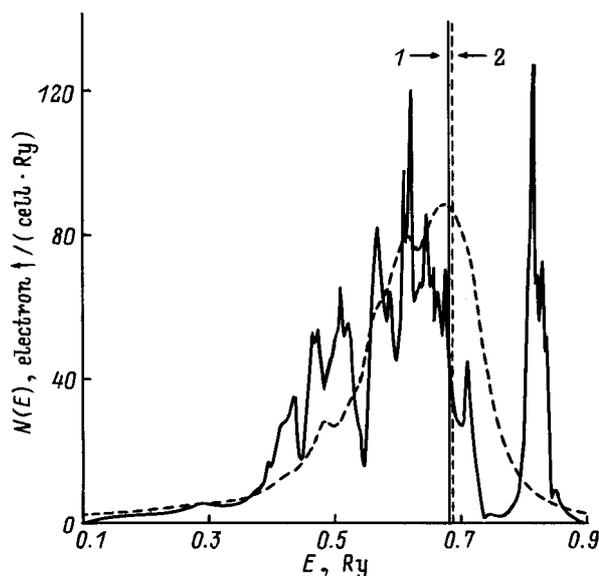
Методом, основанным на включении статистики в теорию многократного рассеяния через функцию распределения атомов по узлам, рассчитана электронная структура интерметаллида Co_3Ti как при полном атомном порядке, так и при полном беспорядке. Установлена необычная особенность электронной структуры интерметаллида при разупорядочении в твердом состоянии. Анализируются возможные следствия этой особенности.

Интерметаллид Co_3Ti возникает из расплава в атомно-упорядоченном состоянии. В твердом состоянии он обладает уникально большим по сравнению с другими сплавами со сверхструктурой $L1_2$ эффектом увеличения предела текучести с ростом температуры [1]. Возможные причины этого обсуждены в [2]. Интересной особенностью Co_3Ti является способность активно поглощать в теле зерна водород при интенсивной деформации [1]. В последнее время появились достоверные экспериментальные результаты [3] о разрушении атомного дальнего порядка в процессе деформации. Это приводит к предположению о связи эффекта наводороживания с особенностями изменения электронной структуры Co_3Ti при переходе порядок–беспорядок, в данном случае обусловленном деформацией. Однако такое предположение для соединений, образованных из элементов разных концов d -периода, не является очевидным. Действительно, согласно [4], по мере удаления по $3d$ -периоду в таблице Менделеева элементов, образующих соединение, глобальные различия плотности электронных состояний сплавов в упорядоченном и разупорядоченном состояниях нивелируются нарастающей разностью атомных потенциалов компонентов. Поскольку вывод [4] основан на использовании модельных представлений для расчета электронной структуры разупорядоченного состояния, возникает необходимость анализа изменений электронной структуры сплава Co_3Ti при разрушении атомного порядка в рамках метода, базирующегося на первых принципах.

Для расчета электронной структуры был использован метод [5,6]. В отличие от стандартных подходов в [5,6] учитывается рассеяние не на потенциале конкретного атома, заданным образом расположенного на подрешетке и окруженного эффективной средой, а на потенциале рассеивающего центра, учитывающем вероятность нахождения атома на каждой из подрешеток. Тем самым достигнуто полное соответствие со статистической теорией при любой степени атомного порядка сплавов внедрения или замещения. При этом точность расчета электронного спектра не уступает, как показали тестовые расчеты, точности классических методов. В данной работе атомная конфигурация компонентов и коэффициент для слэтеровского обмена, а также параметр решетки

интерметаллида Co_3Ti взяты из [7]. Изменением параметра решетки при разупорядочении пренебрегалось. Плотность электронных состояний сплава Co_3Ti вычислялась методом [8], модифицированным на случай комплексного электронного спектра разупорядоченного состояния.

На рисунке представлена плотность электронных состояний для интерметаллида Co_3Ti и его разупорядоченного состояния. Хорошо видно, что все особенности плотности состояний $N(E)$ интерметаллида совпадают с результатами работ [7,9]. Основной чертой спектра интерметаллида является резкое разделение по энергиям d -состояний кобальта и титана, причем уровень Ферми расположен в окрестности верха преимущественно "кобальтовой" d -зоны. В то же время кривые $N(E)$ для упорядоченного и разупорядоченного Co_3Ti (в противовес представлениям [4]) отличаются коренным образом. Анализ электронных потенциалов в ячейках Co и Ti в обоих структурных состояниях сплава показал следую-



Плотности электронных состояний интерметаллида Co_3Ti (сплошная линия) и его разупорядоченного состояния. Вертикальные линии 1 и 2 обозначают соответствующие уровни Ферми.

шее. Зонные состояния титана, генетически связанные с атомными d -состояниями и располагающиеся в упорядоченном Co_3Ti существенно выше уровня Ферми, при разупорядочении смещаются вниз по энергиям вплоть до перекрывания с состояниями кобальта в окрестности уровня Ферми. Это обусловлено перераспределением электронной плотности из-за изменения типа ближайшего соседства. Таким образом, весь спектр теряет тонкую структуру не за счет "диагонального" беспорядка [4], а за счет так называемого "недиагонального", связанного с существенным различием степени пространственной локализации d -волновых функций кобальта и титана.

В целом возникает неочевидная, возможно общая для особого класса сплавов d -элементов, ситуация. При разупорядочении интерметаллида электронный спектр приобретает черты спектра сплавов d -элементов-соседей в таблице Менделеева, но вместе с тем возникают не характерное для таких систем сильное затухание состояний и резкое изменение свойств системы. Так, титановые состояния спектра Co_3Ti , обладая в случае атомного беспорядка (например, как результат механической деформации) высокой плотностью как раз в окрестности уровня Ферми, способны обеспечить появление высокой активности Co_3Ti к поглощению водорода аналогично чистому титану.

В заключение отметим, что, согласно расчету, разница полной электронной энергии разупорядоченного и упорядоченного состояний Co_3Ti составляет ≈ 0.1 Ry/atom. Это соответствует температуре Курнакова, намного превышающей температуру плавления соединения, и согласуется с диаграммой состояний системы Co-Ti [7].

Список литературы

- [1] T. Takasugi, O. Izumi. Acta Met. **33**, 33 (1985).
- [2] Л.Ф. Скоренцев, В.И. Симаков, В.С. Демиденко. Изв. вузов. Физика, **6**, 14 (1996).
- [3] С.В. Старенченко, Н.Р. Сизоненко. и др. Актуальные проблемы прочности. Тез. 1-й Междунар. конф. Новгород (26–30 сентября 1994). Ч. 2. С. 109.
- [4] F. Gauter. Phys. Mod. Mat. **2**, 3 (1980).
- [5] И.А. Нечаев, В.И. Симаков, В.С. Демиденко. Изв. вузов. Физика, **10**, 57 (1995).
- [6] И.А. Нечаев, В.И. Симаков, В.С. Демиденко. Изв. вузов. Физика, **1**, 39 (1997).
- [7] V.I. Simakov, V.S. Demidenko. Phys. Stat. Sol. (b) **103**, 69 (1981).
- [8] F.M. Mueller, I.N. Garland, M.H. Cohen. Ann. Phys., **57**, 19 (1971).
- [9] В.И. Анисимов, Г.В. Ганин. ФММ **68**, 1, 203 (1989).