

## ПОСТРОЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ С КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ

Скорикова Н. А., Чашкина В. Г., Кащенко М. П.

Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия,  
mpk@usfea.ru

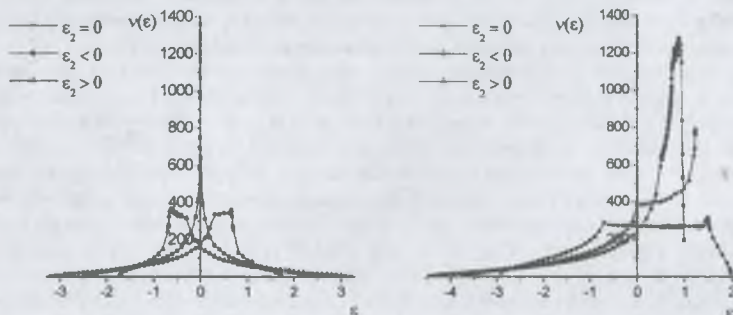
При интерпретации механизма  $\gamma$ - $\alpha$  мартенситного превращения [1] существенно знание распределения электронных состояний (ЭС) по энергии. Большая часть пар ЭС, активных в генерации волн, управляющих ростом мартенситного кристалла, должна локализоваться в окрестности пика плотности состояний. Поэтому важную информацию дает вид плотности состояний  $\nu(\epsilon)$  и ее зависимость от параметров электронного спектра. Удобным в решении этого вопроса является закон дисперсии  $\epsilon(\mathbf{k})$  электронов в приближении сильной связи:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 8\epsilon_1(\cos \eta_1 \cos \eta_2 + \cos \eta_1 \cos \eta_3 + \cos \eta_2 \cos \eta_3) + 2\epsilon_2 \sum_i \cos 2\eta_i,$$

для кристаллов с ГЦК решеткой и

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 16\epsilon_1 \cos \eta_1 \cos \eta_2 \cos \eta_3 + 2\epsilon_2 \sum_i \cos 2\eta_i$$

для кристаллов с ОЦК решеткой, где  $\epsilon_0$  – атомный энергетический уровень, а  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  – интегралы перекрытия с первыми и вторыми соседями,  $\eta_i = ak_i/2$ ,  $a$  – постоянная решетки,  $i = 1, 2, 3$ . При построении плотностей был написан ряд программ на языке Fortran, а также использовалась программа OpenDX. Соответствующие графики  $\nu(\epsilon)$  при  $\epsilon_1 = 0,15625\text{эВ}$  и  $\epsilon_2 = 0$  или  $\epsilon_2 = \pm 0,125\text{эВ}$  приводятся на рис. 1.



Видно, что при  $\epsilon_2 = 0$  максимум состояний в случае ГЦК решетки расположен вблизи потолка зоны, тогда как для ОЦК решетки он локализован в центре зоны, и закономерно смещается при учете  $\epsilon_2$ . Интересно, что в ГЦК решетке при  $\epsilon_2 < 0$  пик ЭС возрастает, а в ОЦК решетке – снижается, а при  $\epsilon_2 > 0$   $\nu(\epsilon)$  уменьшается для обеих решеток. Подобное поведение указывает на возможное неравноправие условий протекания прямого и обратного мартенситных превращений.

1. М. П. Кащенко, Волновая модель роста мартенсита при  $\gamma$ - $\alpha$  превращении в сплавах на основе железа, Наука (1993).