

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

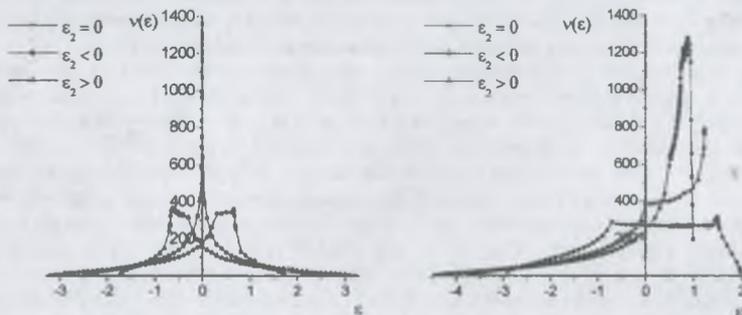
При интерпретации механизма γ - α мартенситного превращения [1] существенно знание распределения электронных состояний (ЭС) по энергии. Большая часть пар ЭС, активных в генерации волн, управляющих ростом мартенситного кристалла, должна локализоваться в окрестности пика плотности состояний. Поэтому важную 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 ϵ_0 – атомный энергетический уровень, а ϵ_1 и ϵ_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 ϵ_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 γ - α превращении в сплавах на основе железа, Наука (1993).