

Исследование влияния легирования на состояния $3d$ -электронов в интерметаллиде Ni_3Al методом аннигиляции позитронов

© А.П. Дружков, Д.А. Перминов, Н.Н. Степанова

Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: druzhkov@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 16 февраля 2010 г.)

Состояния $3d$ -электронов в монокристаллах Ni_3Al с добавкой атомов Fe, Co и Nb изучены методом угловой корреляции аннигиляционного излучения (УКАИ). Спектры УКАИ содержат информацию об импульсном распределении как валентных электронов, так и сильносвязанных $3d$ -электронов интерметаллида. Установлено, что позитроны в Ni_3Al преимущественно аннигилируют в никелевой подрешетке из свободных, делокализованных состояний. Легирование соединения третьим элементом приводит к вариации импульсного распределения $3d$ -электронов Ni вследствие изменения характера межатомных связей. Анализ импульсного распределения показал, что атомы ниобия увеличивают степень ковалентной составляющей химической связи по сравнению с двойным соединением за счет $d_{Nb}-d_{Ni}$ -гибридизации. Добавка атомов кобальта также усиливает тенденцию формирования ковалентной связи. В то же время атомы железа оказывают слабое влияние на электронную структуру интерметаллида.

Работа выполнена по плану РАН (тема № 01.2.006 13394, шифр „Импульс“) при частичной поддержке проекта МНТЦ 3074.2.

1. Введение

Интерметаллическое соединение Ni_3Al (γ' -фаза) упорядочено по типу $L1_2$ и существует в узком интервале концентраций вблизи 75 at.% Ni [1]. Соединение имеет смешанную межатомную связь (металлическую и ковалентную) [2]. Иногда выделяют и ионный вклад [3]. Повышенный интерес к Ni_3Al в последние два десятилетия связан с его уникальными свойствами: высокой температурой плавления, низкой плотностью, жаропрочностью, высокой коррозионной стойкостью. Однако основным барьером для практического применения интерметаллида является его низкая пластичность в поликристаллическом состоянии и склонность к хрупкому разрушению [1]. Одним из способов улучшения механических свойств Ni_3Al является легирование третьим элементом. Ранее было показано, что добавка бора значительно уменьшает охрупчивание материала [4], легирование Hf повышает прочность [5], а такие элементы, как Fe, Co, Mn и Pd, увеличивают пластичность [6,7].

Характерной особенностью интерметаллида Ni_3Al является его способность растворять практически все переходные элементы. Известно, что практически каждый легирующий элемент имеет свой тип замещения. Многочисленные экспериментальные данные [8] позволяют утверждать, что, например, кобальт и ниобий представляют собой элементы с различным типом замещения: атомы Nb будут замещать позиции алюминия, а атомы Co — позиции никеля. Что касается атомов Fe, то они могут входить в обе подрешетки соединения, причем в какую именно, зависит не только от состава тройного сплава Ni_3Al-Fe , но и от температуры [1,9].

Для улучшения механических и физических свойств интерметаллида Ni_3Al с помощью добавки третьего элемента важно иметь представление об изменении

электронной структуры, в частности влияния легирования на характер межатомного взаимодействия, химическую связь, ее тип в соединении. В [10] методом рентгеновской спектроскопии показано, что в соединении $Ni_3(Al,Fe)$ наблюдается более изотропное распределение электронного заряда по сравнению с Ni_3Al , в результате увеличивается степень металлической составляющей связи и соответственно пластичность. В [11] упругие свойства тройного соединения Ni_3Al-M , легированного ниобием или кобальтом, были определены с использованием акустических измерений. Для сплава $Ni_{75}Al_{19}Nb_6$ обнаружено увеличение модулей упругости и значения температуры Дебая. Эти факты указывают на рост сил связи в кристалле Ni_3Al-Nb [12]. Легирование кобальтом сильно влияет на компоненты модуля нормальной упругости, понижает значения модуля сдвига G (до 49 GN/m^2 по сравнению с 73 GN/m^2 в двойном сплаве [11]) и значения температуры Дебая. У монокристалла $Ni_{67}Al_{25}Co_8$ экспериментально обнаружено аномально большое значение фактора упругой анизотропии A по сравнению с монокристаллом Ni_3Al (5.56 и 2.64 соответственно), что подтверждается также результатами измерения коэффициента затухания [11].

В настоящей работе изучено влияние легирования третьим элементом (Fe, Co и Nb) на электронную структуру монокристалла Ni_3Al , в частности на состояния $3d$ -электронов с использованием позитронной аннигиляционной спектроскопии (ПАС). ПАС, физические принципы которой подробно изложены в [13,14], имеет две области применения. Во-первых, угловая корреляция аннигиляционного излучения (УКАИ) дает информацию об электронных свойствах анализируемого материала, в частности об импульсном распределении как валентных электронов, так и электронов ионного остова [15]. Во-вторых, позитроны используются в каче-

стве высокочувствительного зонда дефектов вакансионного типа [16]. Вследствие отсутствия в вакансионном дефекте положительно заряженного иона позитроны захватываются и аннигилируют в дефекте с окружающими электронами. Аннигиляционное излучение в этом случае несет информацию о локальной электронной структуре вакансионного дефекта. Наряду с исследованиями металлов [17] и полупроводников [14] ПАС в последнее десятилетие активно используется для диагностики структурных и электронных свойств интерметаллических соединений [13,18–20]. В частности, в [19] изучалось влияние легирующих элементов на тенденцию Ni–Al-атомных пар формировать ковалентную связь вследствие $d_{\text{Ni}}-p_{\text{Al}}$ -гибридизации в соединения NiAl с B2-структурой.

2. Материалы и методы

Работа выполнена на монокристаллических образцах тройных сплавов Ni₃Al–M, M = Nb, Co, Fe. Составы соединений приведены в табл. 1. Они были выбраны так, чтобы в соответствии с [1] железо и ниобий входили в подрешетку алюминия, а кобальт — в подрешетку никеля. Слитки получали следующим образом: расплав из вакуумной дуговой печи разливали в медную изложницу в форме стержня диаметром 8 мм, длиной 50–60 мм. Затем эти слитки использовали при выращивании монокристаллов методом направленной кристаллизации по Бриджмену в атмосфере аргона. Структура и фазовый состав интерметаллидов аттестовались металлографическими, нейтронографическими и рентгеновскими методами [22]. Монокристаллы Ni₃Al–Nb и Ni₃Al–Fe имели ячеистую, а Ni₃Al и Ni₃Al–Co — ячеисто-дендритную ростовую структуру. После гомогенизирующего отжига (при 1100°C в течение 100 h) все образцы были однофазными. Значения степени дальнего порядка L и постоянной решетки a исследованных образцов взяты из [21] и приведены в табл. 1. Введение Nb (в подрешетку Al) способствует сохранению высокой степени дальнего порядка в соединении, тогда как легирование кобальтом (в подрешетку Ni) и железом (в подрешетку Al) понижает L . Образцы толщиной ~ 4 мм вырезали электроискровым способом из цилиндрических монокристаллов диаметром 8 мм. Перед измерениями образцы подвергали химическому травлению и электролитической полировке.

Состояния позитронов в интерметаллидах диагностировались с помощью УКАИ, которая является одной из методик ПАС [13]. Метод УКАИ был реализован на одномерном спектрометре с разрешением $1 \times 160 \text{ mrad}$ [17]. В качестве источника позитронов использовали радионуклид ⁶⁸Ge активностью ~ 500 MBq. Примерно $8 \cdot 10^5$ совпадений было набрано в каждый спектр УКАИ; отношение „пик к фону“ составляло ~ 10^3 . Спектры УКАИ представляют зависимость скорости счета совпадений от угла θ (где θ — угол

Таблица 1. Состав, параметр решетки a и степень дальнего порядка L интерметаллидов, легированных железом, кобальтом и ниобием

Соединение	Состав, at.%	a , nm (20°C) [21]	L , % (20°C) [21]
Ni ₃ Al	75.3–24.7	0.35705	0.98
Ni ₃ Al–Co	67–25–8	0.35705	0.85
Ni ₃ Al–Nb	75–19–6	0.35956	0.92
Ni ₃ Al–Fe	75–20–5	0.35714	0.85

отклонения аннигиляционных гамма-квантов от антиколлинеарности). Угол $\theta = p_z/m_0c$, где p_z — поперечная компонента импульса электрон-позитронной пары, m_0 — масса покоя электрона, c — скорость света. УКАИ-данные содержат информацию об импульсном распределении аннигилирующих электронов и позволяют разделять вклады от аннигиляции позитронов с валентными электронами (низкоимпульсная часть спектра) и с электронами ионного остова (высокоимпульсная часть спектра) [15]. Кристаллическое поле слабо влияет на сильносвязанные остовные электроны и поэтому высокоимпульсная часть спектра несет информацию о типе атомов, окружающих центр аннигиляции позитронов.

Спектр УКАИ для соединения Ni₃Al хорошо описывается суммой параболической составляющей и гауссианы [23]

$$I(\theta) = I_p(\theta) + I_g(\theta). \quad (1)$$

Параболическая составляющая характеризует аннигиляцию позитронов со свободными электронами, обеспечивающими в интерметаллиде металлическую связь,

$$I_p(\theta) = h_p \left[1 - \left(\frac{\theta}{\theta_p} \right)^2 \right] f(|\theta| - \theta_p), \quad (2)$$

где h_p — высота параболы; $f(|\theta| - \theta_p)$ — функция Хевисайда (которая равна 1, если $|\theta| \leq \theta_p$, и равна 0, если $|\theta| > \theta_p$), θ_p — угол отсечения параболы (угол, при котором значения $I_p(\theta)$ становятся равными нулю). Парабола налагается на широкую, медленно меняющуюся гауссовскую составляющую. Вклад в гауссиану дают как электроны ковалентной связи ($p_{\text{Al}}-d_{\text{Ni}}$ -гибридизированные состояния), так и локализованные электроны ионного остова

$$I_g(\theta) = h_g \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\theta_g^2}\right), \quad (3)$$

где h_g и θ_g — высота и полуширина гауссианы соответственно. Процедура аппроксимации экспериментальных спектров с учетом функции разрешения спектрометра и фона подробно описана в [24]. Параметр подгонки был не выше 1.2. На рис. 1 в качестве примера приведены компоненты УКАИ-спектра для интерметаллида Ni₃Al.

Важным параметром параболической составляющей является угол отсечения θ_p . Согласно приближению

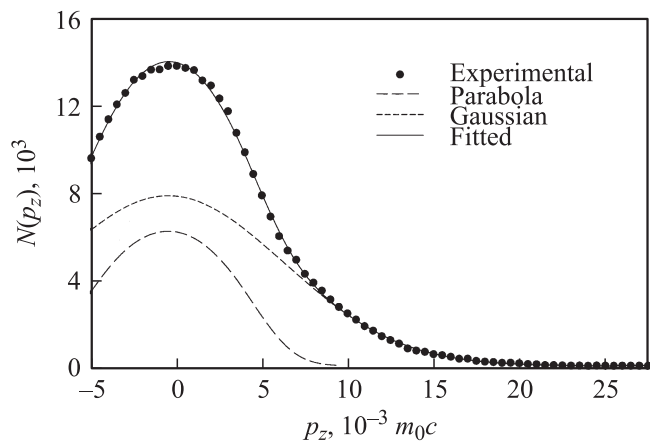


Рис. 1. Спектр УКАИ для монокристалла Ni₃Al и его компоненты.

свободных электронов, с помощью θ_p можно рассчитать число электронов на атом N_f в ГЦК-металлах [25]

$$N_f = 1.46 \cdot 10^{-4} (a\theta_p)^3, \quad (4)$$

где a — постоянная решетки в ангстремах, θ_p — в миллирадианах. В простых металлах N_f равно числу s -подобных электронов. В переходных металлах N_f больше, чем число s -электронов за счет $s-d$ -гибридизации, и соответствует числу почти свободных электронов. В интерметаллиде N_f будет характеризовать металлическую составляющую химической связи.

Вклад электронов ионного остова (в основном 3d-состояний) в УКАИ-спектры переходных металлов (Ti, Fe, Co, Ni) и соединений определялся из кривых отношений [17,23], которые были получены следующим путем: аппроксимированные спектры приводились к единичной площади и делились на спектр стандартного образца. В качестве стандартов использовались хорошо отоженный чистый Al и монокристалл Ni₃Al.

Изменения в форме УКАИ-спектров также характеризовались стандартными S - и W -параметрами [23]. S - и W -параметры определялись как отношение площадей под низкоимпульсной ($p_z \leq 3.5 \cdot 10^{-3} m_0c$) и высокоимпульсной ($15 \cdot 10^{-3} m_0c \leq p_z \leq 25 \cdot 10^{-3} m_0c$) частями к полной площади под спектром. S -параметр характеризует аннигиляцию позитронов с валентными электронами, а W -параметр — с локализованными электронами ионного остова.

3. Результаты и обсуждение

Известно [13], что при образовании интерметаллидов изменяются состояния d -электронов исходных металлов. Вклад d -электронов в аннигиляцию позитронов можно идентифицировать с помощью кривых отношений УКАИ-спектров (см. раздел 2). На рис. 2 показаны кривые отношений для хорошо отоженных чистых 3d- (Ti, Fe, Co, Ni) и 4d-металлов (Nb) относительно

спектра алюминия. Из-за кулоновского отталкивания от атомных ядер термализованные позитроны аннигилируют в основном в межионном пространстве. Однако в переходных металлах в аннигиляции участвуют не только электроны проводимости, но и с большой вероятностью d -электроны [15]. Так как 3d-электроны экранированы от ядра s - и p -электронами, кулоновское отталкивание позитрона ядром в области 3d-оболочки невелико. 3d-электроны относительно сильно связаны с атомом и локализованы в r -пространстве. Следовательно, их импульсное распределение широкое и простирается в область высоких значений импульсов. В алюминии нет d -электронов, аннигиляция происходит на $2s p$ -электронах, где кулоновское отталкивание велико и поэтому вклад собственных остовных электронов Al (в основном 2p-состояний) в аннигиляцию достаточно мал [26].

Кривые отношений представляют собой пик с максимумом в интервале импульсов $(8-11) \cdot 10^{-3} m_0c$, связанный с аннигиляцией позитронов в основном с 3d-электронами переходных металлов [27]. С ростом числа 3d-электронов (от двух в Ti до восьми в Ni) высота пика возрастает, а его максимум сдвигается в область более высоких значений импульсов. Аналогичные результаты дают и расчеты [26]. Что касается ниобия, то, хотя он имеет четыре d -электрона, высота пика совпадает с высотой пика для титана, а максимум пика слегка сдвинут в область меньших значений импульсов. Это обстоятельство связано с тем, что 4d-электроны менее локализованы в атоме по сравнению с 3d-электронами и соответственно дают более узкое импульсное распределение [26]. Таким образом, представленные результаты показывают, что спектры УКАИ несут информацию об индивидуальных особенностях электронной структуры химических элементов.

На рис. 3 приведены кривые отношений (относительно Al) для чистого Ni и интерметаллидов Ni₃Al, Ni₃Al-M ($M = Fe, Co, Nb$). Кривая для интерметаллида Ni₃Al подобна кривой для Ni. Этот факт указывает на то, что позитроны аннигилируют преимущественно в Ni-подрешетке, как и предполагалось ранее [18]. В [18]

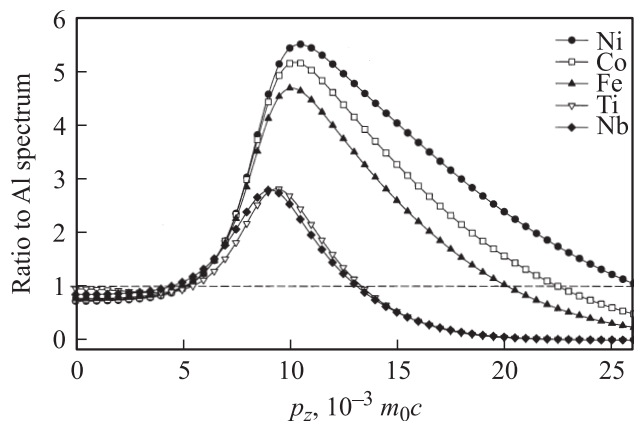


Рис. 2. Кривые отношений интенсивностей спектров УКАИ чистых металлов к интенсивности спектра УКАИ алюминия.

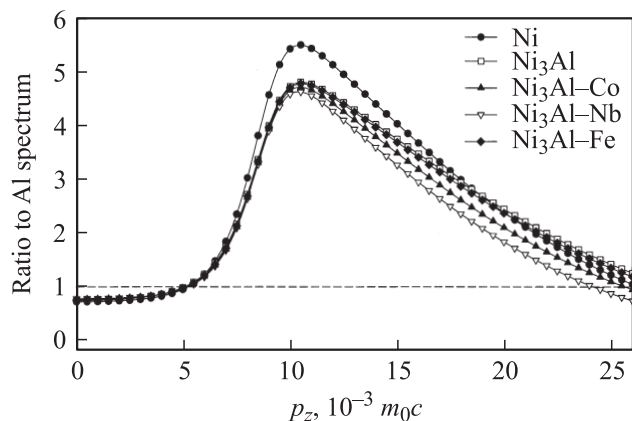


Рис. 3. Кривые отношений интенсивностей спектров УКАИ никеля и интерметаллидов к интенсивности спектра УКАИ алюминия.

было показано, что в Ni_3Al „свободное“ время жизни позитронов τ_f (аннигиляция из блоховских, делокализованных состояний [13]) ниже ожидаемого согласно линейной интерполяции значений τ_f для чистых металлов Ni и Al. Это может быть связано с переносом заряда от атома Al к атомам Ni [28]. Избыточный отрицательный заряд приводит к повышению позитронной плотности в подрешетке переходного металла и соответственно сдвигает τ_f к значению для чистого никеля. Таким образом, как УКАИ-данные, так и измерения времени жизни показывают, что позитроны аннигилируют преимущественно в Ni-подрешетке интерметаллида Ni_3Al .

Пик для Ni_3Al имеет меньшую высоту по сравнению с пиком для никеля (рис. 3). Возможно несколько причин снижения амплитуды пика для Ni_3Al .

1) Часть d -электронов атомов Ni и p -электронов атомов Al формирует ковалентную химическую связь вследствие сильной $d_{\text{Ni}}-p_{\text{Al}}$ -гибридизации ближайших Ni–Al атомных пар [29]. Электроны, занятые в ковалентных связях, сосредоточены в межатомных позициях и характеризуются в импульсном пространстве более низкими значениями импульсов по сравнению с локализованными в атоме электронами [30]. В результате из-за уменьшения заселенности локализованных $3d$ -состояний вероятность аннигиляции позитронов с атомными $3d$ -электронами Ni снижается.

2) Влияние атомной плотности Ni в соединении.

Что касается захвата позитронов дефектами, то, как упоминалось выше, время жизни позитронов в Ni_3Al близко к времени жизни хорошо отожденного чистого Ni. Это время жизни характеризует аннигиляцию позитронов из блоховского, делокализованного состояния в кристаллической решетке (см. табл. 1 в [18]) и демонстрирует отсутствие структурных вакансий в пределах чувствительности метода ($\sim 10^{-6}$ на атом [15]). Этот экспериментальный факт согласуется с теоретическими расчетами для Ni_3Al , согласно которым отклонения от стехиометрического состава в обе стороны компенсиру-

ются дефектами замещения (antisite), а не структурными вакансиями [31].

Никель и Ni_3Al имеют близкие параметры решетки и одно и то же координационное число 12, в Ni_3Al каждый атом Ni имеет в своем ближайшем окружении четыре атома Al и восемь атомов Ni. Следовательно, атомная плотность Ni в соединении меньше, чем в чистом никеле. Таким образом, можно полагать, что высота $3d$ -пика в кривой отношений для Ni_3Al уменьшается вследствие более низкой атомной плотности Ni и образования ковалентной составляющей химической связи.

Таким образом, литературные и наши данные показывают, что в монокристалле Ni_3Al позитроны аннигилируют из квазисвободных, блоховских состояний, причем позитронная плотность концентрируется в основном в Ni-подрешетке. Концентрация позитронов в никелевой подрешетке позволяет диагностировать изменения состояний $3d$ -электронов при легировании интерметаллида третьим элементом.

Кривые отношений для интерметаллидов с добавкой третьего элемента некардинально отличаются от кривой для нелегированного Ni_3Al (рис. 3). Этот факт указывает на то, что и в легированных интерметаллидах отсутствуют дефекты, способные захватывать позитроны. Действительно, в случае тройного соединения вероятность замещения нестехиометрических вакансий легирующим элементом выше, чем компенсация вакансий атомами замещения в двойном соединении. Таким образом, все изменения в спектрах УКАИ можно связать с модификацией электронной структуры соединения легирующим элементом.

Рассмотрим экспериментальные результаты для интерметаллидов, в которых легирующие элементы (Nb, Fe) занимают преимущественно позиции атомов алюминия. Для соединения с ниобием $3d$ -пик (при $p_z \approx 10 \cdot 10^{-3} m_0 c$) ниже и уже, чем в соединениях Ni_3Al , $\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Fe}$ и $\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Co}$ (рис. 3). Соответственно W -параметр имеет самое низкое значение, а S -параметр — самое высокое (табл. 2). S -параметр характеризует аннигиляцию позитронов с валентными электронами. Для интерметаллида под валентными электронами следует иметь в виду как свободные электроны проводимости, так и электроны, обеспечивающие ко-

Таблица 2. Параметры спектров УКАИ для металлов и интерметаллидов

Материал	S -параметр, arb. units	W -параметр, arb. units	N_f , electron per atom
Ni	0.518 ± 0.001	0.0196 ± 0.0004	1.34
Al	0.683 ± 0.001	0.0061 ± 0.0001	2.98
Ni_3Al	0.527 ± 0.001	0.0189 ± 0.0003	2.06
$\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Co}$	0.538 ± 0.001	0.0171 ± 0.0002	1.78
$\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Nb}$	0.545 ± 0.001	0.0156 ± 0.0001	1.70
$\text{Ni}_3\text{Al}-\text{Fe}$	0.532 ± 0.001	0.0185 ± 0.0003	1.90

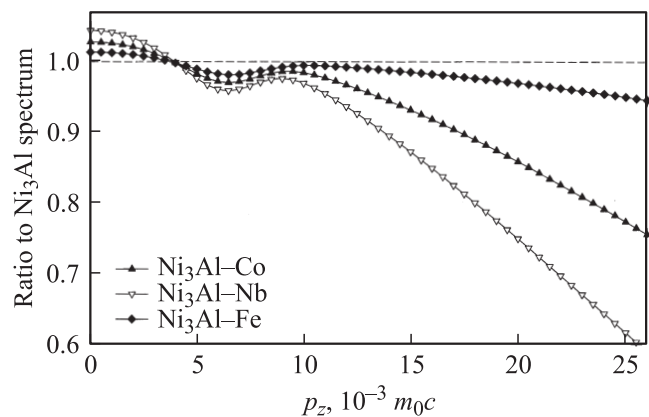


Рис. 4. Кривые отношений интенсивностей спектров УКАИ соединений, легированных третьим элементом, к интенсивностям спектра УКАИ двойного соединения Ni₃Al.

валентную связь. Необходимо понять, чем обусловлен рост S -параметра в соединении с добавкой ниобия.

Информация о свободных электронах может быть получена из анализа параболической компоненты спектров УКАИ (см. выражения (2) и (4)). В табл. 2 приведены значения числа свободных электронов на атом N_f тройных соединений на основе Ni₃Al в сравнении со значениями для Al и Ni. Для алюминия N_f практически равно числу $3sp$ -электронов, в Ni N_f равно 1.34. Из-за частичной $s-d$ -гибридизации это значение существенно выше числа s -электронов на атом [25]. Значение N_f для интерметаллида Ni₃Al значительно выше N_f для никеля. Для легированных соединений значения N_f уменьшаются. N_f характеризует плотность электронов проводимости, т.е. металлическую составляющую химической связи. Как видно из табл. 2, добавка Nb снижает в большей степени металлическую составляющую связи, чем добавка Co или Fe.

Обсудим влияние легирования ниобием на электронную структуру и аннигиляционные параметры в интерметаллиде. Значение S -параметра для Ni₃Al–Nb свидетельствует о том, что вероятность аннигиляции позитронов с валентными электронами в нем выше, чем в Ni₃Al, хотя плотность свободных электронов ниже. Следовательно, рост S -параметра может быть связан с увеличением плотности ковалентных электронов за счет сильной $d_{Nb}-d_{Ni}$ -гибридизации. Низкое значение W -параметра (табл. 2) указывает на снижение заселенности локализованных $3d$ -состояний в никеле. Более наглядно эти особенности видны на кривых отношений спектров УКАИ соединений, легированных третьим элементом, к спектру УКАИ Ni₃Al (рис. 4). Высота пика при $p_z = (8-11) \cdot 10^{-3} m_0c$ для Ni₃Al–Nb, характеризующая локализованные $3d$ -состояния, ниже единицы, тогда как низкоимпульсная (меньше $5 \cdot 10^{-3} m_0c$) часть кривой существенно выше единицы. Увеличение ковалентной составляющей химической связи за счет $d-d$ -гибридизации согласуется с расчетами энергии эффективного парного взаимодействия методом сильной

связи [12,32]. В [12] показано, что атом ниобия в соединении Ni₃Al–Nb взаимодействует с ближайшим атомом Ni в 2 раза сильнее по сравнению с взаимодействием пары Ni–Al в двойном соединении.

Для интерметаллида с добавкой Fe все аннигиляционные параметры близки к параметрам для Ni₃Al (табл. 2), что показывает и кривая отношений, не существенно отличающаяся от единицы (рис. 4). Можно заключить, что атомы железа слабо влияют на состояния $3d$ -электронов Ni и соответственно на ковалентную составляющую химической связи. Этот результат не противоречит данным рентгеновской спектроскопии [10].

Для Ni₃Al–Co кривая отношений (относительно Ni₃Al) имеет те же особенности, что и для соединения с добавкой Nb, только менее выраженные (рис. 4). Амплитуда $3d$ -пика близка к единице, сам пик размыт в высокоимпульсной части, т.е. степень делокализации $3d$ -состояний по сравнению с Ni₃Al невелика. Интенсивность низкоимпульсной компоненты хотя и выше единицы, но ниже, чем в Ni₃Al–Nb. Соответственно плотность свободных электронов N_f имеет промежуточное значение (табл. 2), т.е. степень металлической составляющей связи выше, чем в Ni₃Al–Nb, но ниже двойного соединения и Ni₃Al–Fe. Небольшое увеличение ковалентности связи в соединении с добавкой кобальта по сравнению с Ni₃Al может быть связано с более сильной $d_{Co}-p_{Al}$ -гибридизацией. Действительно, в [33] показано, что для Co, замещающего позиции Ni, эффективное парное взаимодействие с Al должно быть выше, чем для атомной пары Ni–Al. Следует отметить также, что на аннигиляционные характеристики в Ni₃Al–Co может влиять и пониженная атомная плотность Ni в никелевой подрешетке, где концентрируются позитроны. Как было показано выше (рис. 2), $3d$ -пик для кобальта ниже, чем для Ni, вследствие меньшего числа $3d$ -электронов у кобальта. Следовательно, понижение высоты $3d$ -пика в Ni₃Al–Co может быть связано как с более сильным взаимодействием пары Co–Al, так и с особенностями $3d$ -оболочки кобальта.

Таким образом, представленные в работе результаты демонстрируют эффективность ПАС в диагностике влияния легирующих атомов на состояния $3d$ -электронов в интерметаллиде Ni₃Al.

4. Заключение

В работе был использован метод угловой корреляции аннигиляционного излучения для диагностики вариаций состояний $3d$ -электронов вследствие изменений характера межатомных связей в интерметаллиде Ni₃Al при легировании третьим элементом. Показано, что атомы ниобия увеличивают степень ковалентной составляющей химической связи по сравнению с двойным соединением за счет $d_{Nb}-d_{Ni}$ -гибридизации. Добавка атомов кобальта также усиливает тенденцию формирования ковалентной связи. Атомы железа оказывают слабое влияние на электронную структуру соединения.

Список литературы

- [1] N.S. Stoloff. *Int. Mater. Rev.* **34**, 153 (1989).
- [2] В.И. Анисимов, Г.В. Ганин. *ФММ* **68**, 203 (1989).
- [3] O. Ito, H. Tamaki. *Acta Mater.* **43**, 2731 (1995).
- [4] K. Aoki, K. Ishikawa, T. Masumoto. *Mater. Sci. Eng. A* **192–193**, 316 (1995).
- [5] T. Kruml, J.L. Martin, J. Bonneville. *Phil. Mag. A* **80**, 1545 (2000).
- [6] A. Chiba, S. Harada, S. Watanabe. *Acta Met. Mater.* **39**, 1799 (1991).
- [7] J.A. Horton, M.L. Santella. *Met. Trans. A* **18**, 1265 (1987).
- [8] M.H.F. Sluiter, Y. Kawazoe. *Phys. Rev. B* **51**, 4062 (1995).
- [9] M. Enomoto, H. Harada. *Met. Trans. A* **20**, 649 (1989).
- [10] K. Lawniczak-Jablonska, R. Wojnecki, J. Kachniarz. *J. Phys.: Cond. Matter* **12**, 2333 (2000).
- [11] А.Б. Ринкевич, Н.Н. Степанова, А.М. Бурханов. *ФММ* **102**, 678 (2006).
- [12] Ю.С. Митрохин, В.П. Белаш, Н.Н. Степанова, Ю.Н. Акшенцев, А.Б. Ринкевич, И.Н. Климова. *ФММ* **99**, 47 (2005).
- [13] А.И. Лотков, А.А. Батурин. *Позитронная спектроскопия В2-соединений титана: электронная структура, точечные дефекты и маргенситные превращения*. Изд-во НТЛ, Томск (2004). 232 с.
- [14] R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner. *Positron annihilation in semiconductors: defect studies*. Springer-Verlag, Berlin (1999). 378 p.
- [15] R.W. Siegel. *Ann. Rev. Mater. Sci.* **10**, 393 (1980).
- [16] M. Eldrup, B.N. Singh. *J. Nucl. Mater.* **251**, 132 (1997).
- [17] А.П. Дружков, Д.А. Перминов, Н.Л. Печеркина. *Phil. Mag.* **88**, 959 (2008).
- [18] R. Wurschum, K. Badura-Gergen, E.A. Kummerle, C. Grupp, H.-E. Schaefer. *Phys. Rev. B* **54**, 849 (1996).
- [19] W. Deng, R.S. Brusa, G.P. Karwasz, A. Zecca. *Mater. Sci. Forum* **363–365**, 198 (2001).
- [20] Huang Yuyang, Lu Yanqioing, Zhu Yanyan, Li Yxia, Deng Wen. *Nucl. Instrum. Meth. B* **267**, 3182 (2009).
- [21] Н.Н. Степанова, О.В. Савин, Д.П. Родионов, Ю.Н. Акшенцев, В.А. Сазонова, Ю.Э. Турхан. *ФММ* **90**, 50 (2000).
- [22] Н.Н. Степанова, С.Г. Теплоухов, С.Ф. Дубинин, Ю.Н. Акшенцев, Д.П. Родионов, В.Д. Пархоменко. *ФММ* **96**, 84 (2003).
- [23] А.П. Дружков, Д.А. Перминов, В.Л. Арбузов, Н.Н. Степанова, Н.Л. Печеркина. *J. Phys.: Cond. Matter* **16**, 6395 (2004).
- [24] А.А. Ремпель, А.П. Дружков, А.И. Гусев. *ФММ* **68**, 272 (1989).
- [25] E. Debowska, J. Rudzinska-Girulska. *Phys. Status Solidi B* **148**, 227 (1988).
- [26] V.J. Ghosh, M. Alatalo, P. Asoka-Kumar, B. Nielsen, K.G. Lynn, A.C. Kruseman, P.E. Mijnders. *Phys. Rev. B* **61**, 10092 (2000).
- [27] P. Asoka-Kumar, M. Alatalo, V.J. Ghosh, A.C. Kruseman, B. Nielsen, K.G. Lynn. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2097 (1996).
- [28] T. Nautiyal, S. Auluck. *Phys. Rev. B* **45**, 13930 (1992).
- [29] J.H. Xu, B.I. Min, A.J. Freeman, T. Oguchi. *Phys. Rev. B* **41**, 5010 (1990).
- [30] T. Chiba. *J. Chem. Phys.* **64**, 1182 (1976).
- [31] C.L. Fu, G.S. Painter. *Acta Met. Mater.* **45**, 481 (1997).
- [32] L. Colombo. *Comp. Mat. Sci.* **12**, 278 (1998).
- [33] C. Wolverton, D. de Fontaine. *Rev. B* **49**, 12351 (1994).