

В. А. Трапезников, И. Н. Шабанова, Н. С. Теребова,
А. В. Мурин, Е. А. Наймушина

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ
СТРУКТУРЫ СИСТЕМ
НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ
ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КОНЦЕНТРАЦИИ,
ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ



**В. А. Трапезников, И. Н. Шабанова, Н. С. Терехова,
А. В. Мурин, Е. А. Наймушина**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ
СТРУКТУРЫ СИСТЕМ
НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ
ПРИ ИЗМЕНЕНИИ КОНЦЕНТРАЦИИ,
ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ**



Москва ♦ Ижевск

2011

УДК 539.2 + 669.017
ББК 22.37 + 34.2
И 889

*Печатается по решению Редакционно-
издательского совета УдГУ*

**Трапезников В. А., Шабанова И. Н., Теребова Н. С.,
Мурин А. В., Наймушина Е. А.**

Исследование электронной структуры систем на основе переходных металлов при изменении концентрации, температуры и давления. — М.-Ижевск: Изд-во «Удмуртский университет», Институт компьютерных исследований, 2011. — 216 с.

В монографии рассматривается применение метода рентгеноэлектронной спектроскопии для исследования формирования состава и химической связи внешних и внутренних поверхностей кристаллических, ультрадисперсных и наноструктурных материалов в зависимости от концентрации, температуры и давления. Изложены результаты исследований сложной структуры рентгеноэлектронных спектров, что необходимо для их правильной интерпретации при изучении электронной структуры твердых тел. Большое внимание уделено развитию конструкции рентгеноэлектронных магнитных спектрометров. Объем работ, представленных в монографии, выполнен сотрудниками ФТИ УрО РАН и ГОУВПО УдГУ.

Монография предназначена для студентов и аспирантов, готовящихся к научной работе, преподавателей физических, химических, приборостроительных факультетов вузов, а также для инженеров и научных работников, занимающихся вопросами исследования и анализа поверхности материалов в конденсированном состоянии.

На обложке книги представлен уникальный рентгеноэлектронный магнитный спектрометр с наивысшими в мире чувствительностью и разрешением в интервале энергий от 1 эВ до десятков КэВ с радиусом орбиты 100 см.

ISBN 978-5-4312-0041-0

© В. А. Трапезников, И. Н. Шабанова, Н. С. Теребова,
А. В. Мурин, Е. А. Наймушина, 2011
© ГОУВПО «Удмуртский государственный университет», 2011

Оглавление

Введение	7
ГЛАВА I. АППАРАТУРА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ (РЭС).....	9
1.1. Принципы и возможности метода РЭС	9
1.2. Электронные магнитные спектрометры	10
1.3. Первый отечественный рентгеноэлектронный магнитный спектрометр.....	12
1.3.1. Компенсация внешних полей.	12
1.3.2. Энергоанализатор электронного магнитного спектрометра ...	13
1.3.3. Глубина отбора аналитической информации.....	15
1.3.4. Методика получения спектров	16
1.3.5. Дополнительные приспособления в электронном магнитном спектрометре	17
1.3.6. Методика очистки поверхности образцов при понижении температуры до 147 К.....	19
Заключение.....	25
Список литературы.....	25
ГЛАВА II. КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ	27
2.1. Электронные орбитали в многоэлектронных атомах	27
2.2. Влияние вероятности фотоионизации d-электронов на форму рентгеновских фотоэлектронных спектров.....	28
2.3. Исследование влияния энергии возбуждения электронов на форму рентгеноэлектронных спектров валентных полос 3d-металлов ...	30
2.4. Исследование электронной структуры бинарных сплавов Me-Me, Me-X на основе переходных металлов.....	36
2.4.1. Концентрационное исследование электронной структуры сплавов Fe-Cr, Ni-Mo	37
2.4.2. Концентрационное исследование электронной структуры систем Fe-Si.....	39
2.5. Сравнительное теоретическое исследование электронной структуры систем Fe ₅₀ Si ₅₀ , Fe ₃₀ Ge ₅₀ , Fe ₃₀ Sn ₅₀	45

2.6. Рентгеноэлектронное исследование электронной структуры сплавов $\text{Fe}_{50}\text{Si}_{50}$, $\text{Fe}_{50}\text{Ge}_{50}$, $\text{Fe}_{50}\text{Sn}_{50}$, Fe_3Si , Fe_3C	50
2.7. Экспериментальное и теоретическое исследование электронной структуры систем Ni-X (X = Al, Si, P)	59
2.8. Изучение электронной структуры инварных сплавов на основе Fe и Co	65
Заключение	78
Список литературы	80

ГЛАВА III. ТЕМПЕРАТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ

3.1. Температурная зависимость электронной структуры систем переходных металлов в кристаллическом состоянии	83
3.1.1. Изучение влияния добавок Si, C, Ni на изменение электронной структуры сплавов на основе α -железа при температуре 193 К	83
3.1.2. Исследование изменений электронной структуры сплава α -Fe, содержащего 2.7 % Si, при температуре 193 К	84
3.1.3. Исследование изменения электронной структуры сплава, содержащего 0.2 ат. % C, при понижении температуры до 193 К	86
3.1.4. Исследование изменения электронной структуры сплава α -железа с добавкой 3.8 ат. % Ni при понижении температуры до 193 К	88
3.1.5. Теоретическое описание явления хладноломкости структурно однородных кристаллов металлов и сплавов	90
3.2. Изучение электронной структуры стали ВНС 2, содержащей 14% хрома	100
3.2.1. Исследование изменения электронной структуры легированной хромом стали при понижении температуры до 147 К....	101
3.2.2. Исследование обратимости изменений, происходящих в электронной структуре сплава при понижении температуры ниже температуры вязко-хрупкого перехода	104
3.2.3. Рентгеноэлектронное исследование влияния термической обработки на электронную структуру хромистой стали при понижении температуры ниже температуры хрупко-вязкого перехода	106
3.3. Экспериментальные исследования высокотемпературных сверхпроводящих пленок системы Y-Ba-Cu-O методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии	108
3.3.1. Исследование электронной структуры атомов меди	109

3.3.2. Исследование электронной структуры атомов бария	111
3.3.3. Рентгеноэлектронное исследование влияния содержания кислорода на электронную структуру ВТСП Y-Ba-Cu-O	113
3.3.3.1. Исследование влияния содержания кислорода на электронную структуру атомов меди.....	113
3.3.3.2. Исследование влияния содержания кислорода на электронную структуру атомов бария	116
3.3.3.3. Исследование электронной структуры атомов кислорода для образцов $YBa_2Cu_3O_x$ с различным содержанием кислорода x	117
3.3.4. Исследование влияния температуры на электронную структуру валентных полос по данным рентгеновских эмиссионных и рентгеновских электронных спектров	118
3.3.5. Исследования влияния структурных сдвигов, рассчитанных методом FP-LMTO, на электронную структуру Y-Ba-Cu-O	121
3.3.6. Влияние допирования на электронную структуру $YBa_2Cu_3O_x(Ag)$	122
3.4. Рентгеноэлектронное исследование электронной структуры ВТСП системы Bi-Sr-Ca-Cu-O в зависимости от состава и температуры.....	125
Заключение	129
Список литературы	132

ГЛАВА IV. РАЗРАБОТКА НАУЧНЫХ ОСНОВ МЕТОДОВ РАДИАЦИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ИЗДЕЛИЙ, РАБОТАЮЩИХ В ЦИКЛИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ, УПРОЧНЕНИЯ И САМОУПРОЧНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ С ЦЕЛЬЮ ПРЕДОТВРАЩЕНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ И РАЗВИТИЯ УСТАЛОСТНЫХ ТРЕЩИН ПОД ДЕЙСТВИЕМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАГРУЗОК

4.1. Повышение прочности тонких поверхностных слоев твердых тел за счет кратковременного увеличения межатомных сил связи ..	137
4.2. Электронная спектроскопия малых доз излучения	145
4.3. Эмиссия электронов из церия, празеодима, неодима и самария под давлением.....	157
4.4. Исследование электронной структуры систем на основе церия.....	162
4.4.1. Характер межатомного взаимодействия в системах церия ..	162
4.4.2. Влияние внешних воздействий.....	168

4.4.3. Исследований взаимосвязи особенностей строения рентгено- электронных спектров с параметрами тяжелофермионного состояния	175
Заключение	180
Список литературы	181

ГЛАВА V. ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОСИСТЕМ, ПОЛУЧАЕМЫХ СИНТЕЗОМ ИЗ D-МЕТАЛЛОВ И SP-ЭЛЕМЕНТОВ	185
5.1. Развитие метода рентгеноэлектронной спектроскопии для изучения наночастиц	185
5.2. Влияние добавок sp-элементов в углеродных наноструктурах на повышение активности синтеза наночастиц	191
5.3. Определение зависимости получения сверхвысокого атомного магнитного момента d-металлов в наноструктурах от заполнения d-оболочек атомов компонентов и межатомного взаимодействия d- и p-электронов	198
5.4. Разработка рекомендаций для улучшения прочностных и магнит- ных свойств промышленных материалов путем модифицирова- ния их наноструктурами	206
Заключение	211
Литература	212