

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**РЕНТГЕНОВСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ
СПЕКТРЫ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ**

Материалы
XXIII Всероссийской конференции
с международным участием
(Воронеж, 1–4 октября 2019 г.)



Воронеж
Издательский дом ВГУ
2019

УДК 539.216:539.26(075)
ББК 22.344я7
Р39

Редакционная коллегия:
Э. П. Домашевская, В. А. Терехов, С. Ю. Турищев

Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь :
Р39 материалы XXIII Всероссийской конференции с международным участием (Воронеж, 1–4 октября 2019 г.) / ред. кол.: Э. П. Домашевская, В. А. Терехов, С. Ю. Турищев ; Воронежский государственный университет. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2019. – 171 с.
ISBN 978-5-9273-2883-3

XXIII Всероссийская конференция с международным участием «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь» является очередной в цикле всероссийских конференций, посвященных применению и развитию рентгеновских и электронных методов исследования новых химических соединений и перспективных материалов. Предыдущая конференция проходила в 2016 г. во Владивостоке на базе Дальневосточного федерального университета.

УДК 539.216:539.26(075)
ББК 22.344я7

ISBN 978-5-9273-2883-3

© Воронежский государственный университет, 2019
© Оформление. Издательский дом ВГУ, 2019

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИЦИОННО-СЛОЖНОГО СПЛАВА $Al_8Co_{17}Cr_{17}Cu_8Fe_{17}Ni_{33}$ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Касатиков С.¹, Фантин А.², Сахоненков С.¹, Филатова Е.¹, Шумахер Г.², Манцони А.².

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Институт физики, Санкт-Петербург, Россия

² Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Берлин, Германия
e-mail: fiztl@yandex.ru, тел.: +7 911 0984341

Исследование электронной структуры является необходимыми для понимания физических, химических и механических свойств металлических сплавов [1]. Информация о влиянии распределения валентных электронов и их концентрации на стабильность фаз представляется важным для получения новых сплавов и контролирования их механических свойств [2, 3].

В данной работе было проведено исследование электронной структуры композиционно-сложного сплава (КСС) $Al_8Co_{17}Cr_{17}Cu_8Fe_{17}Ni_{33}$ методом рентгеновской спектроскопии поглощения, посредством анализа ближней тонкой структуры спектров поглощения (NEXAFS), и методом фотоэлектронной спектроскопии (XPS). Полученные NEXAFS спектры вблизи $L_{2,3}$ краёв поглощения Cr, Fe, Co, Ni и Cu сплава и соответствующих чистых металлов предоставили информацию об изменении заселённости и энергетического распределения 3d состояний данных элементов в результате образования сплава. Кроме того, анализ XPS спектров внутренних электронных 2p уровней Cr, Fe, Co, Ni и Cu позволил исследовать возможный перенос заряда между элементами сплава.

Было установлено, что формирование сплава ведет к уменьшению заселённости 3d состояний Cr, Fe и Co. При этом перенос заряда между элементами сплава является незначительным. Данный факт может быть объяснен внутриатомным перераспределением валентных электронов между 3d и 4s/4p состояниями и дальнейшим формированием химических связей за счёт делокализованных 4s/4p состояний. Более того, образование сплава приводит к энергетическому перераспределению 3d состояний Ni: максимум плотности незаполненных состояний сдвигается на 0.4 эВ от уровня Ферми, что указывает на особую роль атомов Ni в химическом взаимодействии при формировании сплава.

Полученные результаты указывают на присутствие ближнего порядка в сплаве, вопреки ожидаемому состоянию неупорядоченного твёрдого раствора, в котором атомы представляются химически неразличимыми, что приводит к отсутствию преференций в образовании химических связей.

M. G. Poletti & L. Battezzati, *Acta. Mater.*, **2014**, 75, 297-306;

S. Guo & C. T. Liu, *Pro. Nat. Sci-Mater.*, **2011**, 21, 433-446;

S. Guo, et al., *J. Appl. Phys.*, **2011**, 109, 103505.