

ВЛИЯНИЕ ОТКЛОНЕНИЯ ОТ СТЕХИОМЕТРИИ И ЛЕГИРОВАНИЯ ЖЕЛЕЗОМ И МЕДЬЮ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И СТАБИЛЬНОСТЬ КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА NiTi

В. И. Анисимов, М. А. Коротин, Э. З. Курмаев

Методом ЛМТО-функций Грина проведен расчет электронной структуры фазы В2 интерметаллида NiTi, а также примесей Ni в узле Ti, Fe и Cu в узле Ni. Используя линейное приближение для зависимости полной плотности состояний разбавленного сплава от концентрации, определили электронную структуру соединений Ni₅₂Ti₄₈, Ti₅₀Ni₄₅Fe₅ и Ti₅₀Ni₄₀Cu₁₀. Полученные результаты позволили сделать выводы об изменении структурных свойств NiTi при отклонении от эквиатомного состава, а также при легировании железом и медью.