РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 102 сторінок, 16 таблиць, 35 рисунки, 73 літературних джерела.

МОДЕЛЮВАННЯ, СТРУКТУРА, ЕНТРОПІЯ, СПЛАВ, AB – INITIO, ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛ, АТОМ, FLAPW, ЕНЕРГІЯ.

Об'єкт досліджень: модельні структури з ОЦК граткою.

Мета роботи: теоретичне дослідження атомної будови та міжатомних взаємодій в кристалічних структурах, які моделюють багатокомпонентний сплав TiZrHfCoNiCu.

Методи досліджень: ab – intio методи розрахунку атомної та електронної структури кристалів FLAPW (пакет Wien2k) та метод псевдопотенціалу (Quantum Espresso).

Результати досліджень та їх новизна:

Розрахована атомна будова модельної структури $Ti_9Zr_9Hf_9Co_9Ni_9Cu_9$ симетрії B2. Встановлено, що довжини міжатомних звязків значно відрізняються від довжин в ідеальній гратці ОЦК типу, що призводить до більших зміщень атомів з ідеальних положень. Показано, що причиною викривлень кристалічної гратки структури $Ti_9Zr_9Hf_9Co_9Ni_9Cu_9$ є сильна міжатомна взаємодія атомів Ti з атомами Co, Ni і Cu. Характерною особливістю цих взаємодій є значно менша довжина звязку Ti – B (B = Co, Ni, Cu) в порівнянні з довжинами звязку Zr – B та Hf – B. Методом псевдопотенціалу розраховані енергії звязку атомів Co, Ni та Cu в модельних структурах A_8B_8 (A = Ti, Zr, Hf; B = Co, Ni, Cu). Встановлено, що у всіх структурах найбільшу енергію звязку має атом Co (-8,1 -8,5 еВ), а найменшу атом Cu (-5,1 -5,4 еВ).

Сфера застосування: аерокосмічна галузь, машинобудівна та приладобудівна.