

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.915, 539.612, 544.14

DOI: 10.17223/00213411/63/5/3

А.В. БАКУЛИН<sup>1,2</sup>, С.С. КУЛЬКОВ<sup>2</sup>, С.Е. КУЛЬКОВА<sup>1,2</sup>АДГЕЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА TiAl/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> \*

В рамках теории функционала электронной плотности проведено систематическое изучение атомной и электронной структуры границы раздела между сплавом  $\gamma$ -TiAl и  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в зависимости от конфигурации контакта. Рассчитаны энергии отрыва пленки сплава от оксидной поверхности для разных ее окончаний. Показано, что высокие значения энергии адгезии могут быть получены на интерфейсе с О-окончанием оксида алюминия вследствие большого ионного вклада в энергию химической связи. Проведен анализ структурных и электронных факторов, ответственных за понижение адгезии на границе раздела с металлическим окончанием оксида. Расчет интерфейсной энергии подтвердил, что граница раздела с О-окончанием оксида алюминия является энергетически предпочтительной.

**Ключевые слова:** граница раздела, адгезия, химическая связь, электронная структура, теория функционала электронной плотности.

## Введение

Композитные материалы на основе металлов/сплавов и оксидов нашли широкое применение в современных технологиях, интерес к которым обусловлен возможностью получения материалов, существенно отличающихся по своим свойствам от компонент, входящих в его состав. Физико-химические и механические свойства композитов существенно зависят от характеристик образующихся границ раздела металл – оксид, которые определяются их атомной и электронной структурой. Знание электронной структуры необходимо для понимания природы химических связей на границах раздела и механизмов повышения адгезии. Поскольку явления на таких границах раздела являются определяющими для многих технологических процессов, то они достаточно интенсивно исследуются на протяжении последних десятилетий, в том числе методами теории функционала электронной плотности, например, [1–13] и ссылки в них. Наибольшее число работ посвящено изучению границы раздела Nb(111)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001), на которой обнаружена высокая энергия адгезии  $\sim 9.8\text{--}10.6$  Дж/м<sup>2</sup> [2–5, 9, 11], а также интерфейсам между ГЦК-металлами, такими, как Al, Ni, Cu, Ag, Au и др., и оксидом алюминия [6–8, 10]. Обычно рассматривается взаимодействие отдельных атомов или монослоев металлов с оксидной поверхностью, что важно для механизмов роста металлических пленок, но не позволяет выявить тенденции в формировании стабильных границ раздела. Кроме того, при окислении металлов и сплавов имеет место рост оксидной пленки на их поверхности. Это предполагает изучение взаимодействия атомарного или молекулярного кислорода со стабильными поверхностями металлов и сплавов, как было сделано в работах [14–18]. В настоящее время имеются лишь единичные работы, в которых изучается атомная и электронная структура, а также механические и термодинамические свойства границ раздела сплав – оксид, причем в большинстве работ в качестве оксида рассматривался  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> со структурой корунда [19–21]. Поскольку механизм химической связи на интерфейсе существенно зависит от электронной структуры сплавов, то необходимы систематические сравнительные исследования адгезионных свойств границ раздела в рамках единого подхода. Цель настоящей работы – изучение атомной и электронной структуры границы раздела TiAl(111)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) в зависимости от конфигурации контакта и окончания поверхности (0001) оксида.

## Метод расчета

Расчет атомной и электронной структуры границы раздела TiAl(111)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) проводился методом проекционных присоединенных волн (PAW) в плосковолновом базисе [22, 23] с использованием обобщенного градиентного приближения в форме GGA-PBE [24] для обменно-

\* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, проект III.23.2.8. Численные расчеты проводились на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://www.elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>