ELECTRONIC STRUCTURE AND ORDERING

F. Ducastelle

► To cite this version:

F. Ducastelle. ELECTRONIC STRUCTURE AND ORDERING. Journal de Physique Colloques, 1977, 38 (C7), pp.C7-272-C7-273. 10.1051/jphyscol:1977753 . jpa-00217256

HAL Id: jpa-00217256

<https://hal.science/jpa-00217256>

Submitted on 1 Jan 1977

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ELECTRONIC STRUCTURE AND ORDERING

F. DUCASTELLE

Office National d'Études et de Recherches Aéronautiques (ONERA), 92320 Châtillon, France

Résumé. — Pour étudier les phénomènes d'ordre dans les alliages, on utilise habituellement des modèles simples (le modèle d'Ising le plus souvent) dans lesquels on introduit des interactions de paires phénoménologiques.

Le problème est donc de savoir si de telles interactions peuvent être définies à partir de la structure électronique des alliages (on ne s'intéresse pas ici aux effets élastiques).

Cela est possible dans le cas des métaux normaux (alcalins, etc...) en partant de la théorie du pseudo-potentiel [1]. Quoiqu'il y ait certains problèmes quand on étudie des alliages non isoélectroniques, des progrès appréciables ont été accomplis ces dernières années [2] et il semble qu'un calcul soigneux des pseudopotentiels puisse conduire à des résultats réalistes [3].

Le cas des métaux de transition est *a priori* plus difficile car l'énergie totale d'un métal pur ne s'écrit pas comme somme d'interaction de paires. Il est possible cependant de calculer de façon assez précise l'énergie de cohésion de ces métaux [4]. Par ailleurs, on dispose maintenant d'une théorie (l'approximation du potentiel cohérent : CPA [5]) permettant de décrire les alliages concentrés désordonnés ; on peut ainsi estimer les énergies de formation des alliages [6]. La CPA peut être généralisée pour tenir compte d'un ordre partiel ; on a donc accès aux énergies d'ordre [7]. Un fait remarquable est que ces énergies d'ordre varient comme le carré du paramètre d'ordre, comme dans les théories phénoménologiques [8]. Il est alors possible de définir une méthode de perturbation généralisée et par conséquent des interactions de paires effectives [9]. Des calculs ont été faits à partir de modèles très simples qui semblent en accord qualitatif avec les résultats expérimentaux, du moins pour les composés de type CsCl de la famille TiFe, VMn, ...

Ces interactions de paires effectives ont certaines propriétés particulières :

- elles dépendent de la concentration ; ceci était vrai également dans le cas des métaux normaux, mais les effets ici peuvent être plus violents. Par exemple certaines interactions peuvent changer de signe en fonction de la concentration [10] ;
- elles sont à courte portée, sauf dans le cas où les potentiels atomiques diffèrent peu du potentiel atomique moyen ;
- elles sont spécifiques aux phénomènes d'ordre et ne doivent pas être utilisées pour calculer d'autres propriétés physiques.

Abstract. — In most cases ordering processes in alloys are described by using simple models (in general the Ising model) in which phenomenological pairwise interactions are introduced.

The problem is therefore to enquire whether such interactions can actually be defined from the electronic structure of the alloy (elastic effects will not be considered here).

This is possible in the case of normal metals (alkaline metals, ...) by starting from the pseudo-potential theory [1]. Though problems remain for treating non isoelectronic alloys, appreciable progresses have been made in this field these last years [2] and it seems that careful pseudopotential calculations can lead to realistic results [3].

The case of transition metals is *a priori* more complex since the total energy of a pure metal cannot be written as the sum of pair interactions. Rather accurate calculations of the cohesive energy of these metals have nevertheless been performed [4]. In the other hand a theory is now available (the coherent potential approximation : CPA [5]) for describing concentrated disordered alloys ; thus energies of formation can be estimated [6]. The CPA can be extended in order to deal with partial ordering ; in this way ordering energies can be obtained [7]. It turns out that these ordering energies vary as the square of the order parameter, exactly as in the phenomenological theories [8]. It is then possible to define a generalized perturbation method and therefore effective pair interactions [9]. Some calculations have been made with very simple models ; they are in qualitative agreement with the experimental results, at least for the ClCs-type compounds of the series TiFe, VMn, ...

These pair interactions have some particular properties :

- they depend on the concentration ; this was also true in the case of normal metals, but this effect can be larger here. For example the sign of some interactions can change as a function of the concentration [10] ;
- they are short ranged, except when the atomic potentials are not very different from the average atomic potential ;
- they are specific to ordering processes and should not be used for calculating other physical properties.

References

- [1] HEINE, V., COHEN, M. L. and HEINE, V., HEINE, V. and WEAIRE, D., in *Solid State Physics*, Vol. 24 (1970).
- [2] INGLESFIELD, J. E., *J. Phys. C* **2** (1969) 1285 and 1293.
KRASKO, G. L. and MAKHNOVETSKII, A. B., *Phys. Stat. Sol. (b)* **65** (1974) 869 ; **66** (1974) 349 ; **80** (1977) 341.
- [3] HAFNER, J., *J. Phys. F* **6** (1976) 1243, *Liquid Metals 1976*, R. Evans and D. A. Greenwood ed. (The Institute of Physics, Bristol and London) 1977, p. 102.
- [4] FRIEDEL, J., *The Physics of Metals*, J. M. Ziman ed. (Cambridge University Press) 1969, p. 340.
DUCASTELLE, F. and CYROT-LACKMANN, F., *J. Phys. & Chem. Solids* **32** (1971) 285.
GELATT, C. D., EHRENREICH, H. and WATSON, R. E., *Phys. Rev. B* **15** (1977) 1613.
MORUZZI, V. L., WILLIAMS, A. R. and JANAK, J. F., *Phys. Rev. B* **15** (1977) 2854.
- [5] For a review, see : ELLIOTT, R. J., KRUMHANSL, J. A. and LEATH, P. L., *Rev. Mod. Phys.* **46** (1974) 465.
- [6] GAUTIER, F., VAN DER REST, J. and BROUERS, F., *J. Phys. F* **5** (1975) 1884.
VAN DER REST, J., GAUTIER, F. and BROUERS, F., *J. Phys. F* **5** (1975) 2283.
GAUTIER, F., MORAITIS, G. and PARLEBAS, J. C., *J. Phys. F* **6** (1976) 381.
- [7] PLISCHKE, M. and MATTIS, D., *Phys. Rev. Lett.* **27** (1971) 42 ; *Phys. Rev. B* **7** (1973) 2430.
- [8] BROUERS, F., GINER, J. and VAN DER REST, J., *J. Phys. F* **4** (1974) 214.
GINER, J., BROUERS, F., GAUTIER, F. and VAN DER REST, J., *J. Phys. F* **6** (1976) 1281.
- [9] GAUTIER, F., DUCASTELLE, F. and GINER, J., *Phil. Mag.* **31** (1975) 1373.
DUCASTELLE, F. and GAUTIER, F., *J. Phys. F* **6** (1976) 2039.
TREGLIA, G., DUCASTELLE, F. and GAUTIER, F., to be published (1977).
- [10] GINER, J. and GAUTIER, F., *J. Physique Colloq.* **38** (1977) C7.