

В. А. Лихачев
В. Е. Шудегов

**ПРИНЦИПЫ
ОРГАНИЗАЦИИ
АМОРФНЫХ
СТРУКТУР**



**ИЗДАТЕЛЬСТВО
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

С.-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

В. А. ЛИХАЧЕВ, В. Е. ШУДЕГОВ

ПРИНЦИПЫ
ОРГАНИЗАЦИИ
АМОРФНЫХ
СТРУКТУР



ИЗДАТЕЛЬСТВО С.-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

1999

УДК 539.3:548.4

ББК 22.37

Л 65

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, проф. В. И. Бетехтин (Физико-техн. ин-т им. А. Ф. Иоффе РАН),
д-р физ.-мат. наук, проф. М. А. Хусаинов (Новгородский гос. ун-т)

*Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
С.-Петербургского государственного университета*

Лихачев В. А., Шудегов В. Е.

Л 65 **Принципы организации аморфных структур.** — СПб.:
Издательство С.-Петербургского университета, 1999. — 228 с.
ISBN 5-288-01763-8

Монография посвящена систематическому изложению современных представлений о строении и принципах структурообразования аморфных веществ, преимущественно неорганических стекол и металлоаморфных материалов. Приведены основные сведения о характере заполнения пространства неупорядоченными атомными конфигурациями. Дан анализ некристаллических состояний в физическом и геометрическом аспектах. Изложены элементы теории стекла. Обсуждены методы компьютерного моделирования структуры стекол, стеклообразования и аморфизации. Приведены результаты многочисленных конкретных расчетов, выполненных на основе молекулярно-динамических подходов. Значительное внимание уделено исследованию роли дефектов дисклинационного типа (дисклинаций, диспираций, диспланаций) в образовании аморфных веществ. Установлена фундаментальная роль этих дефектов в физике некристаллического состояния.

Издание рассчитано на специалистов в области физики и химии стекла, а также на широкий круг читателей, интересующихся современными проблемами физики и механики новых материалов и физики твердого тела.

Библиогр. 428 назв. Табл. 5. Ил. 122.

Тем. план 1998 г., № 98

ББК 22.37

© В. А. Лихачев,
В. Е. Шудегов, 1999
© Издательство
С.-Петербургского
университета, 1999

ISBN 5-288-01763-8

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	3
Глава 1. АМОРФИЗАЦИЯ И СТЕКЛООБРАЗОВАНИЕ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ	7
§ 1.1. Основные методы получения некристаллических материалов.....	7
1.1.1. Получение аморфных (стеклообразных) веществ из жидкой фазы.....	7
1.1.2. Получение аморфных веществ из газовой фазы.....	11
1.1.3. Аморфизация кристаллических материалов под действием внешних условий.....	12
§ 1.2. Кинетика аморфизации.....	15
§ 1.3. Критерии аморфизации.....	19
1.3.1. Критерии на основе критической скорости охлаждения.....	19
1.3.2. Критерии на основе приведенной температуры.....	20
1.3.3. Определение склонности к аморфизации по виду диаграммы состояния.....	21
1.3.4. Геометрические критерии.....	22
1.3.5. Химические критерии.....	23
1.3.6. Структурные критерии.....	24
1.3.7. Электронные критерии.....	26
Глава 2. СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ	29
§ 2.1. Функции радиального распределения атомов.....	29
§ 2.2. Модели на основе случайной плотной упаковки жестких сфер.....	33
2.2.1. Модель Бернала.....	34
2.2.2. Модель Гаскелла.....	37
2.2.3. Модель на основе полиэдров Франка—Каспера.....	38
§ 2.3. Понятие дисклинаций. Модели на основе дисклинационноподобных дефектов.....	39
2.3.1. Дисклинации Ривьера.....	46
2.3.2. Дислокационно-дисклинационная модель Морриса.....	49
2.3.3. Полиэдрические модели.....	50
2.3.4. Полиэдры Вороного.....	58
§ 2.4. Модели на основе искривленных пространств.....	60

2.4.1. Модели на основе пространств с постоянной положительной кривизной	61
2.4.2. Модели на основе пространств с постоянной отрицательной кривизной	70
§ 2.5. Модели строения однокомпонентных аморфных веществ на основе классических дисклинаций	73
§ 2.6. Дисклинационная модель строения двухкомпонентных стекол	82
2.6.1. Дисклинации в двухкомпонентных кристаллах	82
2.6.2. Ансамбли дисклинаций в двухкомпонентных стеклах	92
§ 2.7. Континуальное описание ансамблей дисклинаций	96
§ 2.8. Моторный анализ дефектов. Взаимосвязь моделей на основе искривленных пространств и теории дисклинаций	98
2.8.1. Определение мотора	98
2.8.2. Моторный анализ континуума дефектов	99
2.8.3. Связь тензоров плотностей дефектов с картановым кручением и римановой кривизной	101
Глава 3. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ	108
§ 3.1. Метод молекулярной динамики	108
§ 3.2. Потенциалы межатомного взаимодействия и их выбор	111
§ 3.3. Расчет псевдопотенциалов по схеме Хейне—Абаренкова—Анималу	114
§ 3.4. Расчет однокомпонентных веществ	122
§ 3.5. Расчет двухкомпонентных веществ	130
Глава 4. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ ВЕЩЕСТВ	144
§ 4.1. Моделирование стеклования в Fe, Fe—В, Fe—Mn	144
§ 4.2. Моделирование аморфизации кластеров никеля и железа	155
4.2.1. Влияние геометрических размеров и температуры	156
4.2.2. Влияние примесных и легирующих атомов	159
§ 4.3. Аморфизация железа при ионном облучении	162
§ 4.4. Аморфизация ГКЦ-кристаллов в условиях импульсных внешних нагрузок и больших пластических деформаций	165
§ 4.5. Аморфизация сплава Fe—50%Mn при больших пластических деформациях	172
§ 4.6. Моделирование пластических деформаций стекол	185
§ 4.7. Краткие сведения о квазикристаллах	188
§ 4.8. Сравнение электронных спектров кристаллов, квазикристаллов и стекол	196
Послесловие	201
Указатель литературы	203