

## АМОРФНЫЕ МЕТАЛЛЫ: СВОЙСТВА, ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ

А.Н. Панченко, студент

Волгоградский государственный университет  
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-6-4-120-123

**Аннотация.** В данной статье рассматриваются основные свойства, методы получения и сферы применения аморфных металлов. С помощью квантово-химических расчетов методом DFT функционалом B3LYP показана возможность получения аморфного металла на основе полимерной матрицы и добавки в качестве атомов бора. Представлены расчеты оптимизации геометрии, энергии связи, ширины запрещенной зоны, одноэлектронные спектры, плотность состояния.

**Ключевые слова:** аморфные металлы, аморфизирующие элементы, полимерная матрица, метод DFT.

В огромном мире материаловедения группа необычных материалов, известных как аморфные металлы или металлические стекла, привлекла внимание многих исследователей. В отличие от традиционных кристаллических металлов с их упорядоченным расположением атомов, аморфные металлы обладают уникальной неупорядоченной атомной структурой, которая обуславливает замечательный набор свойств. От их исключительной прочности и твердости до повышенной коррозионной стойкости и магнитных свойств аморфные металлы предлагают множество возможностей для различных применений во многих отраслях промышленности.

По своей сути аморфные металлы характеризуются отсутствием дальнего порядка в расположении их атомов. Этот беспорядок возникает из-за быстрого охлаждения расплавленных металлических сплавов, которое эффективно замораживает атомы в неупорядоченном состоянии, прежде чем они смогут сформировать правильную кристаллическую решетку. В результате получается материал со стекловидной некристаллической структурой, сочетающий в себе лучшие свойства металлов и стекол.

Одним из наиболее заметных свойств аморфных металлов является их исключительная прочность. Это свойство делает их невероятно прочными и устойчивыми к деформации, что делает их идеальными для приложений, требующих прочных ма-

териалов, таких как структурные компоненты в аэрокосмической и автомобильной промышленности.

Помимо прочности, аморфные металлы также обладают впечатляющей твердостью. Их неупорядоченное расположение атомов препятствует легкому движению дислокаций, которые представляют собой атомные дефекты, способствующие пластической деформации кристаллических материалов. В результате аморфные металлы демонстрируют высокие значения твердости, соперничающие с некоторыми из самых твердых кристаллических материалов или превосходящие их. Это свойство делает их подходящими для режущих инструментов, износостойких покрытий и других применений, где важна твердость.

Коррозионная стойкость – еще одна отличительная черта аморфных металлов. Аморфные металлы очень стабильны в агрессивных средах, что делает их привлекательными для применения в химической промышленности, морском оборудовании и биомедицинских устройствах. Их коррозионная стойкость не только продлевает срок службы компонентов, но также снижает затраты на техническое обслуживание и повышает общую производительность.

Более того, аморфные металлы обладают уникальными магнитными свойствами, которые отличают их от кристаллических материалов. Некоторые аморфные сплавы металлов обладают высокой намагничен-

ностью насыщения, низкой коэрцитивной силой и отличными магнитомягкими свойствами. Эти свойства делают их ценными при производстве трансформаторов, магнитных датчиков и других магнитных устройств. Возможность изменять магнитные свойства аморфных металлов с помощью состава сплава открывает возможности для инновационных разработок и повышения производительности в различных областях применения.

Аморфные металлы также нашли свое место в развивающейся области аддитивного производства, также известной как 3D-печать. Возможность изготовления изделий сложной геометрии и контроля свойств материала на микроскопическом уровне является существенным преимуществом аморфных металлов в этом контексте.

Итак, как же получить аморфные металлы? Процесс включает преодоление естественной склонности металлов к образованию упорядоченных кристаллических структур. Как правило, металлы охлаждаются и затвердевают в кристаллическом состоянии, при этом атомы выстраиваются в регулярные структуры. Однако, тщательно контролируя скорость охлаждения, можно заморозить жидкий металл до неупорядоченного состояния, в результате чего получится аморфная структура [1].

Наиболее распространенным методом получения аморфных металлов является быстрое затвердевание или закалка. В этом процессе расплавленный металлический сплав охлаждается с чрезвычайно высокой

скоростью. Это быстрое охлаждение не позволяет атомам организоваться в кристаллическую решетку, эффективно «замораживая» их в неупорядоченном расположении.

Хотя быстрое затвердевание является наиболее распространенным методом, исследователи постоянно изучают альтернативные подходы к получению аморфных металлов. Некоторые из этих методов включают механическое сплавление, электроосаждение и ионную имплантацию.

Также одним из способов получения аморфных металлов является добавление металлических частиц в полимерную матрицу вместе с элементами – кремний, бор, углерод, фосфор. Такие элементы называются аморфизирующими присадками, они позволяют стабилизировать аморфную структуру. С помощью квантово-химических расчетов можно показать существование такого аморфного композита. В качестве полимерной матрицы выбран пиролизированный полиакрилонитрил, а в качестве стабилизирующего элемента атомы бора [2-5].

Получение аморфной структуры моделировалось следующим образом: над поверхностью металлокомпозита (рассматривалось два металлокомпозита «ППАН+Ni» и «ППАН+Co») на расстоянии 3 Å располагались атомы бора. Полная оптимизация структуры позволила определить энергию связи, ширину запрещенной зоны, заряды на атомах, длины связей. Данные характеристики представлены в таблице.

Таблица. Основные характеристики композита с атомами бора

| Композит | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Заряды на атоме металла | Заряды на атомах бора | Длина связи, Å |       |       |       |
|----------|-------------------|-----------------------------|-------------------------|-----------------------|----------------|-------|-------|-------|
|          |                   |                             |                         |                       | Me-B           | Me-C  | C-B   | B-B   |
| ППАН+Co  | 7,34              | 1,15                        | 0,336                   | -0,005<br>0,251       | 2,016          | 1,815 | 1,512 | 1,568 |
|          |                   |                             |                         |                       | 2,026          | 1,823 |       |       |
|          |                   |                             |                         |                       | 2,026          | 2,026 |       |       |
| ППАН+Ni  | 7,28              | 1,08                        | 0,133                   | 0,272<br>0,299        | 1,879          | 1,876 | 1,610 | 1,555 |
|          |                   |                             |                         |                       | 1,927          | 1,947 |       |       |
|          |                   |                             |                         |                       |                | 1,732 |       |       |

Поиск минимальной энергии рассматриваемых наноструктур позволил установить пространственную ориентацию атомов бора относительно

металлокомпозита. Рассмотрим структуру металлокомпозитов с аморфизирующими элементами более подробно. При взаимодействии атомов бора с

металлокомпозитом «ППАН+Ni» наблюдается следующее: Атомы бора сближаются и образуют молекулу  $B_2$ , данная молекула приближается параллельно слою и образует четыре связи с композитом, две связи с атомом никеля и две связи с атомами углерода. С

композитом «ППАН+Co» наблюдается немного другая картина, атомы бора также образуют молекулу, но димер бора поворачивается относительно слоя и приближается к атому кобальта, образуя при этом три связи, две с атомом металла и одну с атомом углерода (рис. 1).

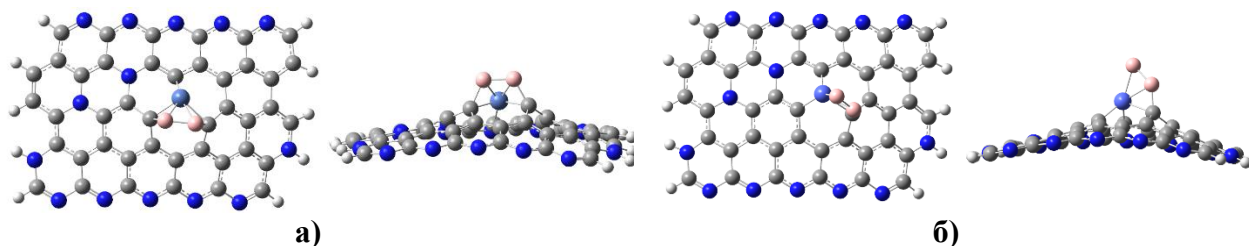


Рис. 1.Metalлокомпозит с атомами бора: а) «ППАН+Ni»; б) «ППАН+Co».

Анализ электронно-энергетического строения нанокompозита показывает, что уровни молекулярных орбиталей (МО)

группируются в зоны. На рисунке 2 построены одноэлектронные спектры и плотность состояния.

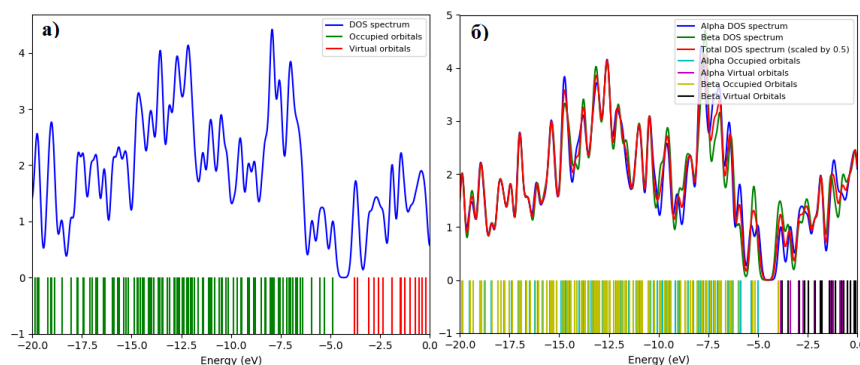


Рис. 2. Плотность состояния и одноэлектронные спектры композита с атомами бора: а) «ППАН+Ni»; б) «ППАН+Co».

Итак, применение аморфных металлов охватывает широкий спектр отраслей промышленности. Их исключительные механические свойства, в том числе высокая прочность, пределы упругости и твердость, делают их подходящими для конструкционных компонентов, таких как аэрокосмические детали, спортивные товары и медицинские имплантаты. Аморфные металлы также обладают превосходной коррозионной стойкостью, что делает

их идеальными для использования в химической и морской среде. Кроме того, их уникальные магнитные свойства нашли применение в трансформаторах, двигателях и магнитных датчиках. Проведено моделирование металлокомпозита, содержащего атомы никеля и кобальта и аморфизирующего элемента – бора. Показана стабильность полученной модели, что свидетельствует о возможности создания такого аморфного металлокомпозита.

#### Библиографический список

1. Лупачев, Д.А. Аморфные металлы в водородной энергетике / Д.А. Лупачев, М.И. Смирнов // Студенческий вестник. – 2018. – № 11-6 (31). – С. 22-24.
2. Simulation of pyrolysed polyacrylonitrile based composite with amorphising boron additives / O.A. Kakorina, I.V. Zaporotzkova, I.A. Kakorin, L.V. Kozhitov // Journal of Physics: Conference Series: Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems,

Voronezh, 11-13 ноября 2019 года. Vol. 1479. – Voronezh: Institute of Physics Publishing, 2020. – P. 012131. – DOI 10.1088/1742-6596/1479/1/012131.

3. Theoretical studies of the structure of the metal-carbon composites on the base of acrylonitrile nanopolymer / I.V. Zaporotskova, L.V. Kojitov, O.A. Davletova [et al.] // Журнал нано- и электронной физики. – 2014. – Vol. 6, № 3. – P. 03035.

4. Pyrolyzed Polyacrylonitrile Based Composite with Amorphizing Silicon Additives / O. Kakorina, I. Zaporotskova, I. Kakorin [et al.] // Moscow Workshop on Electronic and Networking Technologies, MWENT 2020 – Proceedings, Moscow, 11-13 марта 2020 года. – Moscow, 2020. – P. 9067360. – DOI 10.1109/MWENT47943.2020.9067360.

5. Панченко, А.Н. Квантово-химические исследования получения композита на основе полимера – пиролизованного полиакрилонитрила / А.Н. Панченко, И.А. Какорин // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2022. – № 6-2(69). – С. 10-12. – DOI 10.24412/2500-1000-2022-6-2-10-12.

## AMORPHOUS METALS: PROPERTIES, PREPARATION AND APPLICATION

**A.N. Panchenko**, *Student*  
**Volgograd State University**  
**(Russia, Volgograd)**

**Abstract.** *This article discusses the main properties, methods of production and applications of amorphous metals. The possibility of obtaining an amorphous metal based on a polymer matrix and additives as boron atoms is shown using quantum chemical calculations by the DFT functional B3LYP. Calculations of optimization of geometry, binding energy, band gap width, single-electron spectra, state density are presented.*

**Keywords:** *amorphous metals, amorphizing elements, polymer matrix, DFT method.*