

МЕТАЛЕВЕ СКЛО

Ст.: Ю.О. Варфоломеєва, А.А. Гнатюк

Кер.: Д.Б. Глушкова, Н.Л. Дьяконенко¹

Харківський національний автомобільно-дорожній університет

¹ Національний технічний університет «ХПІ»

Скло вважають одним з найсучасніших матеріалів: вікна, посуд, оптичні прилади, волоконно-оптичні кабелі, фасади хмарочосів, художні вироби, тканини та інше.

Найважливішими властивостями скла, що визначають умови використання, є ізотропність, в'язкість, крихкість, прозорість, зручність обробки, хімічна стійкість, низька теплопровідність, невеликий коефіцієнт лінійного розширення, дешевизна. Але, якщо поєднати фізичні властивості скла (крихкі й течкі) і металу (жорсткі й міцні), це буде металеве скло. Відомо з 1960-х років, що можна перетворити окремі сплави на металеве скло, швидко охолоджуючи їх: сотні градусів за частки секунди. Таким чином отримати сплав, який поводить себе як метал і скло. Деякі з них утричі міцніші за титан і мають модуль пружності кістки, але при цьому надзвичайно легкі. Вони також значно простіші в обробці, ніж метали.

Наприклад, армоване скло Gorilla Glass покриває телефони, телевізори й іншу побутову електроніку, тому вона не розбивається після падіння. Ругех, який використовують у дзеркалах для телескопів і випікання, є термостійким. В ідеалі потрібен тип скла, за допомогою якого можна будувати літаки, автомобілі, будинки і навіть космічні кораблі. На даний час для цього застосовується сталь. Але металеве скло має краще поєднання властивостей за будь-яку сталь, тому має можливість перетворити світ.

Чому так не трапляється? Тому що експериментальні дослідження не мають достатнього обґрунтування - немає чіткого зв'язку між атомною структурою та здатністю утворювати скло. З'ясування атомної структури скла є однією з найважливіших, але нерозв'язаних проблем у науці. Скло, яке є аморфною твердою речовиною, має у своєму складі атоми, розташовані в хаотичній випадковій структурі, а в металах - у впорядкованій решітці. Прогнозувати здатність до утворення скла за атомною структурою та передбачити, яка комбінація металів зробить кращі види металевого скла дозволяє модель атомної

структури металевго скла. У дослідженні, опублікованому в журналі Nature [1] було досліджено біля 200 нових металевих скляних сплавів на основі титану, магнію, срібла, міді та цинку. Механічні та фізичні властивості таких сплавів сильно залежать від концентрацій хімічних елементів. Коли правильна комбінація елементів нагрівається або охолоджується за визначених температур з визначеною швидкістю, утворюються матеріали з унікальними властивостями.

Правильна комбінація виникає, коли локальна упаковка атомів навколо неосновних (розчинених) атомів і зв'язки між різнорідними атомами сприяють виникненню структуроутворюючих кластерів. Ефективна упаковка досягається при визначених співвідношеннях радіусів між атомами розчиненої речовини та розчинника, які дають збіднені кластери з центральним атомом розчиненої речовини, оточеним атомами розчинника. Найстабільніші види скла звичайно багаті на розчинені речовини, де перша координаційна сфера розчиненого атома містить атоми розчиненої речовини та розчинника.

Шляхом дослідження структурних дефектів, які перешкоджають утворенню металевго стекла, знаходяться відповіді, як забезпечити ефективну упаковку одночасно навколо кожного атома в склі; відносні розміри й концентрації атомів та різні кластери, які вони створюють для самоузгоджених складів. На жаль, це можливо лише для невеликої кількості бінарних структур. Але додаткові ступені свободи в структурах з трьома або більш різними розмірами атомів значно розширюють число відносно стабільних, «об'ємних» видів металевго скла.

Запропонована структурна модель виявила існування нових потрійних раніше не відомих систем металевго скла: Mg – Ag – Yb; Mg – Pd – Ca і Mg – Pd – Yb. Також була знайдена найвища температура склування для будь-якого скла утворюючого металевго сплаву на основі Mg (**485 K** для **Mg_{67,5} Pd₂₅ Ca_{7,5}**).

Залежність товщини скла від середньої ефективності упаковки навколо *n* складових атомів показала, що сплави Pd – Ni – P і Ca – Mg – Zn мають максимальну аморфну товщину, коли середня ефективність упаковки близька до 100%. Аморфна товщина значно зменшується, коли атоми перепаковані або недостатньо упаковані.

1. Law K.J., Miracle D.B., Ferry M. A predictive structural model for bulk metallic glasses. *Nature Communications*. 2015. volume 6, Article number: 8123.