

Кинетика изотермической нуклеации в переохлажденном расплаве железа

© А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, Е.В. Левченко, О.Б. Логачев

Воронежский государственный технический университет,
394026 Воронеж, Россия

E-mail: evteev@vmail.ru

(Поступила в Редакцию 27 июня 2005 г.)

Построена изотермическая кинетическая диаграмма начала процесса гомогенной нуклеации в молекулярно-динамической модели мгновенно переохлажденного расплава железа вблизи температуры икосаэдрического перколяционного перехода, отождествляемой с температурой стеклования T_g . Эта диаграмма сопоставлена с теоретической, для расчета которой использована количественная информация, полученная на основе анализа кинетики начальной стадии роста закритических зародышей при температурах выше T_g . Удовлетворительное совпадение теоретической кривой с результатами компьютерного эксперимента выше T_g и существенное расхождение этих результатов ниже T_g , где процессу кристаллизации обязательно предшествует образование икосаэдрического перколяционного кластера, свидетельствует о существенном влиянии икосаэдрической субструктуры на предсказываемую классической теорией скорость зарождения.

PACS: 61.20.Ja, 64.60.Ak

1. Введение

Фундаментальная проблема перестройки атомной структуры расплава в процессе стеклования остается на протяжении нескольких десятилетий предметом многочисленных теоретических исследований [1–7]. Основной трудностью на пути раскрытия физической природы превращения жидкости в стекло является отсутствие законченной теории структурной организации даже простых жидкостей [8]. Формирование современных представлений о структуре простых жидкостей началось с появлением работы [9], в которой было показано, что расплавы чистых металлов могут быть переохлаждены до температур намного меньших (на $\sim 20\%$) равновесной температуры кристаллизации. Эти результаты убедительно продемонстрировали, что структура простых жидкостей принципиально отличается от структуры кристаллов и не может быть описана в рамках микрокристаллических и подобных им моделей. В связи с этим для описания структуры жидкости в работе [10] была предложена модель политераэдрической плотной упаковки атомов, основным структурным элементом ближнего порядка которой предлагалось считать атомную конфигурацию, образующую икосаэдр, содержащий шесть осей симметрии пятого порядка, несовместимых с трансляционной симметрией кристаллов. Недавно были получены первые экспериментальные свидетельства присутствия икосаэдрического ближнего порядка в расплавах чистых металлов Pb [11]; Fe, Ni, Zr [12]; Co [13]; Cu [14] и увеличения его объемной доли при переохлаждении [12–14]. Однако применение экспериментальных дифракционных методов раскрывает лишь тенденции в изменении симметрии ближнего порядка при охлаждении расплава, но не вносит ясность в структурные аспекты организации среды.

В настоящее время одним из наиболее эффективных подходов к изучению принципов структурной организации неупорядоченных систем является компьютерное

моделирование с его возможностями анализа атомной структуры, закономерностей пространственно-временной эволюции всех частиц системы [15–19]. С этим подходом связаны определенные успехи и в формировании теоретических представлений о структурообразовании металлических стекол из расплава [2–5].

В [4,5] была предложена структурная модель стеклования чистых металлов, устанавливающая принципиальные различия между атомной структурой расплава и металлического стекла. В рамках метода молекулярной динамики на примере модели железа с парным потенциалом межатомного взаимодействия Пака–Доямы [20] было показано [5], что в основе структурной организации аморфной фазы чистых металлов лежит образование в точке стеклования и последующий рост перколяционного кластера из взаимопроникающих и контактирующих между собой икосаэдров, в вершинах и центрах которых расположены атомы. Здесь под взаимопроникающими понимаются икосаэдры, у которых атомы, расположенные в центрах одних, одновременно являются вершинными атомами других икосаэдров. Контактующие по граням, ребрам и вершинам икосаэдры имеют соответственно три, два и один общий атом. Выявленные закономерности самоорганизации икосаэдрической субструктуры при стекловании хорошо коррелируют с температурными зависимостями основных термодинамических характеристик модели [5], которые обнаруживают некоторые признаки фазового перехода второго рода [21] и объясняют их поведение на микроскопическом уровне. Эти результаты позволили сделать предположение [5], что фрактальный кластер из несовместимых с трансляционной симметрии икосаэдров, в построении которых задействовано более половины всех атомов, играет роль сдерживающего кристаллизацию связующего каркаса и является той фундаментальной основой структурной организации твердого аморфного состояния чистых металлов, которая принципиально отличает его от расплава.

В настоящей работе на основе результатов серии компьютерных экспериментов, поставленных в рамках метода молекулярной динамики, исследовано влияние температуры изотермического отжига на кинетику икосаэдрического перколяционного перехода и начало процесса гомогенной нуклеации в переохлажденном расплаве железа.

2. Описание модели

Исходная молекулярно-динамическая модель жидкого железа была построена при $T = 2300$ К с плотностью 7800 kg/m^3 (плотность задавали в соответствии с данными для $\alpha\text{-Fe}$ [22] с учетом поправки $\sim 1\%$ на аморфизацию). В качестве исходной структуры была взята случайная плотная упаковка атомов. Взаимодействие между атомами описывали с помощью эмпирического парного потенциала Пака–Доямы, который имеет вид [20]

$$\Phi(r) = -0.188917(r - 1.82709)^4 + 1.70192(r - 2.50849)^2 - 0.198294 \text{ eV}, \quad (1)$$

где r выражено в \AA . Радиус обрезания потенциала (расстояние, при котором потенциал и его первая производная плавно обращаются в нуль) равен $r_c = 3.44 \text{ \AA}$. Параметры этого потенциала определены из данных по упругим свойствам $\alpha\text{-Fe}$. Использование его при моделировании жидкого и аморфного железа [23–25], а также его сплавов с металлоидами [26,27] обеспечивает хорошее согласие расчетных и экспериментальных структурных характеристик. Модель содержала 100 000 атомов в основном кубе с периодическими граничными условиями. Атомам в начальный момент времени сообщались скорости согласно распределению Максвелла. Методика молекулярно-динамического расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения с временным шагом $\Delta t = 1.523 \cdot 10^{-15} \text{ s}$ по алгоритму Верле [28]. Система выдерживалась при указанной температуре в течение 3000 временных шагов (изотермические условия). Затем температурное ограничение снималось, и в системе на протяжении 3000 временных шагов при постоянной внутренней энергии (адиабатические условия) устанавливалось тепловое равновесие.

Далее система в изохорических условиях исследовалась в диапазоне температур 1240–900 К с шагом 20 К. Процедура моделирования сводилась к мгновенному понижению температуры расплава до заданной температуры исследования и изотермическому отжигу при этой температуре до момента начала интенсивного роста образовавшегося критического по размеру кристаллического зародыша. Измерение структурных характеристик системы производилось циклически через каждые $5000 \times \Delta t$ или $0.7615 \cdot 10^{-11} \text{ s}$. Каждый цикл отжига при заданной температуре включал $1000 \times \Delta t$ в изотермических и $4000 \times \Delta t$ в адиабатических условиях.

Усреднение термодинамических характеристик системы проводилось в течение последних $2000 \times \Delta t$ каждого цикла. Следует отметить, что температура T системы, находящейся в адиабатических условиях, и заданная температура исследования (температура „окружающей среды“) строго не совпадают между собой. После каждого цикла систему методом статической релаксации переводили в состояние с $T = 0$ К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах, а затем проводили структурный анализ модели.

Для регистрации момента образования критического по размеру кристаллического зародыша, который впоследствии начинал интенсивно расти, и икосаэдрического перколяционного кластера использовались два вида анализа: статистико-геометрический (на основе многогранников Вороного) и кластерный (на основе теории протекания), детали которых подробно описаны в работах [4,5,29,30].

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 показаны результаты измерения времени изотермического отжига до начала образования икосаэдрического перколяционного кластера и критического зародыша ОЦК фазы в переохлажденном расплаве железа в диапазоне температур 1240–900 К. Установлено, что образование и последующий рост икосаэдрического перколяционного кластера происходит только ниже критической температуры $T_g \approx 1180$ К. Следует отметить, что эта температура совпадает с температурой образования икосаэдрического перколяционного кластера при стекловании молекулярно-динамической модели расплава железа в условиях линейного охлаждения со скоростью $4.4 \cdot 10^{12} \text{ K/s}$ [5]. Кроме того, как видно из рис. 1, этой температуре соответствует наименьшее время отжига до начала процесса гомогенной нуклеации.

При повышении температуры ($T > T_g$) это время резко возрастает, а число икосаэдров в системе уменьшается. Устойчивый перколяционный кластер из взаимопроницающих и контактирующих между собой икосаэдров при этом не образуется.

При температурах ниже температуры стеклования ($T < T_g$) началу процесса гомогенной нуклеации всегда предшествуют образование и последующий рост икосаэдрического перколяционного кластера. Здесь важно отметить, что время отжига до образования икосаэдрического перколяционного кластера в исследованном диапазоне температур отжига 1180–900 К не превышает $\sim 1.5 \cdot 10^{-11} \text{ s}$. Поэтому в указанном диапазоне температур для более точного определения момента времени образования икосаэдрического перколяционного кластера измерение структурных характеристик системы на начальных этапах отжига (первые $10000 \times \Delta t$) производилось через каждые $1000 \times \Delta t$.

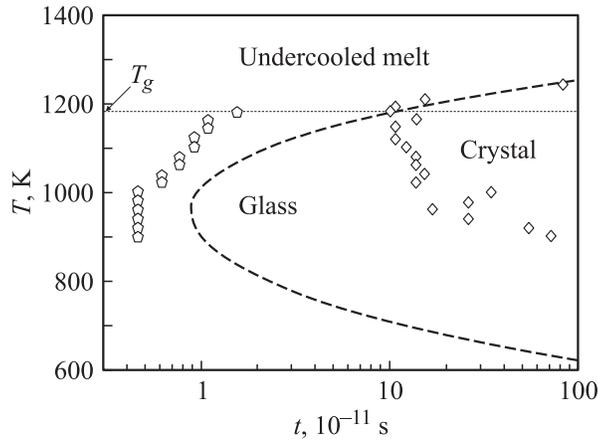


Рис. 1. Изотермическая кинетическая диаграмма начала процесса гомогенной нуклеации в молекулярно-динамической модели мгновенно переохлажденного расплава железа (ромбы). Штриховая кривая проведена согласно уравнению (2). Пятиугольники соответствуют образованию устойчивого икосаэдрического перколяционного кластера. В области температур выше $T_g \sim 1180$ К (штриховая горизонталь) устойчивый икосаэдрический перколяционный кластер не образуется.

С понижением температуры время до начала процесса гомогенной нуклеации, размер, до которого успевает вырасти икосаэдрический перколяционный кластер, и общее число икосаэдров в системе увеличиваются. При этом общая доля атомов, задействованных в построении икосаэдрического фрактального кластера (т.е. атомов, расположенных как в центрах, так и в вершинах икосаэдров, образующих фрактальный кластер), в зависимости от температуры изотермического отжига к моменту образования кристаллического критического зародыша изменяется от $\sim 39\%$ при $T = 1180$ К до $\sim 60\%$ при $T = 900$ К. Было также замечено, что после начала процесса гомогенной нуклеации в системе еще некоторое время продолжается рост икосаэдрического фрактального кластера и общего числа икосаэдров. Этот факт указывает на то, что образование кристаллических зародышей и их рост на ранних стадиях происходят не путем поглощения икосаэдров, а за счет атомов, расположенных в „порах“ фрактального икосаэдрического кластера. Наличие устойчивого к распаду фрактального кластера, включающего в себя более половины атомов системы, ограничивает подвижность остальных атомов, не задействованных в его построении, что сдерживает процесс гомогенной нуклеации.

Отсутствие икосаэдрического перколяционного кластера при температурах выше T_g позволяет сделать вывод о том, что процесс гомогенной нуклеации при этих температурах происходит в полном соответствии с классической теорией зарождения [31,32].

На рис. 1 (штриховая кривая) показана теоретическая кинетическая диаграмма начала процесса гомогенной нуклеации в переохлажденном расплаве железа, построенная в предположении, что во всем изученном темпе-

ратурном диапазоне образование и рост критического кристаллического зародыша происходят в расплаве в отсутствие икосаэдрической субструктуры, сдерживающей процесс зародышеобразования. Из сопоставления полученной в компьютерном эксперименте и рассчитанной в рамках классической теории зарождения кинетических диаграмм начала процесса гомогенной нуклеации в переохлажденном расплаве железа следует, что только при $T \geq T_g$ наблюдается удовлетворительное совпадение полученных результатов. При $T < T_g$ характер поведения этих зависимостей существенно различается — время до начала процесса нуклеации в присутствии икосаэдрического перколяционного кластера значительно возрастает. Расчет теоретической кинетической диаграммы начала процесса гомогенной нуклеации производился по следующей методической схеме.

Среднее время t_c , необходимое для образования критического кристаллического зародыша, рассчитывалось как величина, обратная скорости зарождения [31,32],

$$t_c = J^{-1} = (Nv_a o_c Z)^{-1} \exp\left(\frac{\Delta G_c}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где N — число атомов в системе, v_a — вероятность перехода атома через границу раздела расплав–критический зародыш в единицу времени, o_c — число атомов на поверхности критического зародыша, Z — фактор Зельдовича, ΔG_c — свободная энергия образования критического зародыша. Вероятность, с которой атом, находящийся в контакте с критическим зародышем, перейдет в этот зародыш за единицу времени, можно представить в виде

$$v_a = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta g_a}{k_B T}\right), \quad (3)$$

где v_0 — частота порядка дебаевской, $\Delta g_a = E_a - TS_a$ — свободная энергия активации перехода атомов через границу раздела расплав–критический зародыш (E_a и S_a — энергия и энтропия активации этого процесса). Для сферического критического зародыша радиуса R_c , содержащего n_c атомов, имеем [31,32]

$$R_c = \frac{2V_{at}\sigma}{\Delta\mu}, \quad (4)$$

$$n_c = \frac{4\pi R_c^3}{3V_{at}} = \frac{32\pi V_{at}^2 \sigma^3}{3\Delta\mu^3}, \quad (5)$$

$$\Delta G_c = \frac{4\pi R_c^2 \sigma}{3} = \frac{16\pi V_{at}^2 \sigma^3}{3\Delta\mu^2}, \quad (6)$$

$$o_c = \frac{4\pi R_c^2}{s} = (36\pi)^{\frac{1}{3}} \frac{V_{at}^{\frac{2}{3}}}{s} n_c^{\frac{2}{3}}, \quad (7)$$

$$Z = \left(\frac{\Delta G_c}{3\pi k_B T n_c^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2}{9\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{V_{at}^{\frac{2}{3}} \sigma}{k_B T}\right)^{\frac{1}{2}} n_c^{-\frac{2}{3}}, \quad (8)$$

где σ — свободная поверхностная энергия границы раздела расплав–кристалл; $\Delta\mu$ — разность химических

потенциалов жидкой и кристаллической фаз; V_{at} — объем, приходящийся на атом в кристаллическом зародыше; s — эффективная средняя площадь, занимаемая атомом на поверхности кристаллического зародыша, зависящая, вообще говоря, от размера последнего. С достаточной хорошей точностью можно считать [31,32], что $\Delta\mu = \Delta S_m(T_m - T)$, где ΔS_m и T_m — энтропия и температура плавления соответственно.

Оценка входящих в (2)–(8) параметров была проведена на основе результатов исследования роста закритических зародышей при $T \geq T_g$. Кинетическое уравнение, описывающее изменение числа атомов в закритическом зародыше, можно записать в виде

$$\frac{dn}{dt} = o_n(v_n^+ - v_n^-), \quad (9)$$

где o_n — число атомов на поверхности n -атомного зародыша,

$$v_n^+ = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta g_n^\pm}{k_B T}\right) \quad (10)$$

— скорости перехода атома из расплава в n -атомный зародыш и из n -атомного зародыша в расплав соответственно (Δg_n^\pm — свободные энергии активации этих процессов). Следует отметить, что Δg_n^\pm приближенно можно представить как

$$\Delta g_n^\pm \approx \Delta g_a + \frac{1}{2}(\Delta G_{n\pm 1} - \Delta G_n), \quad (11)$$

где

$$\Delta G_n = -n\Delta\mu + o_n s \sigma \quad (12)$$

— изменение свободной энергии расплава при образовании в нем сферического зародыша, содержащего n атомов [31,32]. Это связано с тем, что Δg_n^\pm есть функции n только вследствие различия энергий ΔG_n и $\Delta G_{n\pm 1}$ (для случая $n > n_c$ имеем $\Delta G_{n-1} > \Delta G_n > \Delta G_{n+1}$). Поэтому, учитывая (5), с достаточной точностью справедливо выражение

$$\Delta g_n^\pm \approx \Delta g_a \mp \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} V_{at}^{\frac{2}{3}} \sigma \left(n_c^{-\frac{1}{3}} - n^{-\frac{1}{3}}\right) \quad (13)$$

(здесь при выводе использовалось соотношение $(1 \pm n^{-1})^{2/3} \approx 1 \pm 2/3n^{-1}$, справедливое для $n \gg 1$). С учетом этого кинетическое уравнение (9) для радиуса закритического зародыша ($nV_{at} = 4\pi R^3/3$, $o_n s = 4\pi R^2$) принимает вид

$$\frac{dR}{dt} = \frac{2V_{at}v_a}{s} \operatorname{sh} \left[\frac{V_{at}\sigma}{R_c k_B T} \left(1 - \frac{R_c}{R}\right) \right]. \quad (14)$$

На основе результатов прямого наблюдения за изменением числа атомов в наибольшем по размеру зародыше в процессе отжига было установлено, что в интервале температур 1180–1240 К число атомов в критическом зародыше находится в пределах от 30

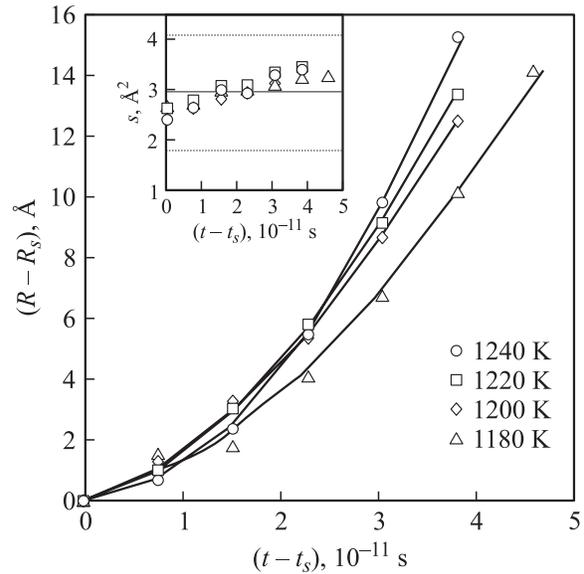


Рис. 2. Кинетика начальной стадии роста закритических зародышей в молекулярно-динамической модели переохлажденного расплава железа при $T \geq T_g$ (точки). Сплошные линии — аппроксимация результатов компьютерного эксперимента на основе уравнения (15). На вставке показано изменение эффективной средней площади s , занимаемой атомом на поверхности закритического зародыша, на начальной стадии роста (точки). Сплошная линия соответствует усредненному значению $s \approx 2.94 \text{ \AA}^2$, используемому при расчетах, штриховые линии — предельным значениям s .

до 80. Здесь сразу следует отметить, что n -атомным зародышем считался кластер, состоящий из n взаимопроницающих координационных многогранников ОЦК решетки (ромбододекаэдров), при этом поверхностными атомами такого зародыша считались o_n атомов, задействованных в построении этих ромбододекаэдров, но имеющих другие координационные многогранники. Для радиуса критического ОЦК зародыша ($V_{at} = a^2/2$, где $a = 2.86 \text{ \AA}$ — параметр решетки α -Fe) с учетом (5) в указанном температурном интервале получаем оценку $\sim 4.4\text{--}6 \text{ \AA}$. Воспользовавшись экспериментальным значением для $\sigma = 1.273 \cdot 10^{-2} \text{ eV/\AA}^2$ [32], легко показать, что при изменении числа атомов в закритическом зародыше в пределах 80–4000 ошибка замены гиперболического синуса его аргументом в (14) не превышает 1%. Далее с помощью соотношения $s = (36\pi V_{at}^{2/3} n^{2/3} / o_n = (9\pi)^{1/3} a^2 n^{2/3} / o_n$ было рассчитано изменение эффективной средней площади, занимаемой атомом на поверхности закритического зародыша, на начальной стадии роста. Результаты расчета для разных температур представлены точками на вставке рис. 2, там же для сравнения приведены предельные значения s (штриховые линии) $(9\pi)^{1/3} a^2 / 14 \approx 1.78 \text{ \AA}^2$ ($n = 1$, $o_n = 14$) и $a^2/2 \approx 4.09 \text{ \AA}^2$ (плоская поверхность). Как видно, отклонение приведенных значений от их средней величины $s \approx 2.94 \text{ \AA}^2$ (сплошная линия) не

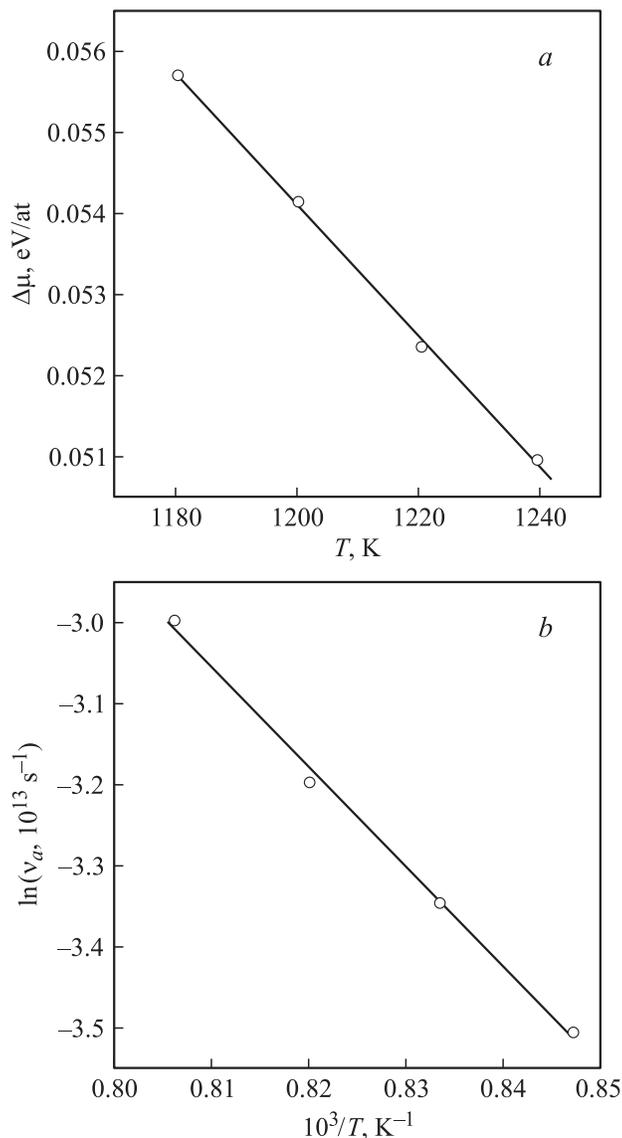


Рис. 3. Температурные зависимости разности химических потенциалов $\Delta\mu$ жидкой и кристаллической фаз (*a*) и вероятности v_a перехода атома через границу раздела расплав–критический зародыш в единицу времени (*b*), определенные с помощью аппроксимации на основе уравнения (15) кинетики начальной стадии роста закритических зародышей в молекулярно-динамической модели переохлажденного расплава железа при $T \geq T_g$.

превышает 20%. Поэтому в рамках рассматриваемой задачи с удовлетворительной точностью величину s в (14) можно считать постоянной. Таким образом, с учетом сделанных оценок и упрощающих допущений кинетическое уравнение для начальной стадии роста закритического зародыша после интегрирования (14) имеет вид

$$R - R_s + R_c \ln \left(\frac{R - R_s}{R_s - R_c} + 1 \right) = \frac{2V_{at}^2 \sigma}{s R_c k_B T} v_a (t - t_s), \quad (15)$$

где $R_c < R_s \leq R$ и $t_c < t_s \leq t$.

На рис. 2 показана кинетика начальной стадии роста закритического зародыша в интервале температур 1180–1240 К. Видно, что уравнение (15) с помощью двух подгоночных параметров R_c и v_a обеспечивает хорошую аппроксимацию (сплошные линии) данных компьютерного эксперимента (точки). Проведенный анализ позволил оценить ΔS_m , T_m из зависимости $\Delta\mu - T$ (рис. 3, *a*) и $v_0 \exp(S_a/k_B)$, E_a из зависимости $\ln(v_a) - T^{-1}$ (рис. 3, *b*). В результате для них были получены следующие значения: $\Delta S_m \approx 0.789 \cdot 10^{-4}$ eV/K, $T_m \approx 1864$ К (экспериментальные значения [32], $\Delta S_m \approx 0.855 \cdot 10^{-4}$ eV/K, $T_m \approx 1803$ К) и $v_0 \exp(S_a/k_B) \approx 896.8 \cdot 10^{13}$ s⁻¹, $E_a \approx 1.05$ eV. Отличие полученной температуры плавления от экспериментальной 1803 К [32] связано с тем, что компьютерный эксперимент проводился в изохорических условиях при постоянной плотности 7800 kg/m³, тогда как плотность реального расплава при температуре плавления равна 7030 kg/m³ [22]. Известно [30], что молекулярно-динамическая модель ОЦК железа с потенциалом Пака–Доямы и плотностью 7800 kg/m³ при нагреве со скоростью $6.6 \cdot 10^{11}$ K/s начинает плавиться вблизи температуры ~ 2040 К. Таким образом, полученное значение T_m является разумной оценкой равновесной температуры плавления молекулярно-динамической модели железа в изохорических условиях при постоянной плотности 7800 kg/m³. Важно также отметить, что полученное значение энергии активации E_a перехода атомов через границу раздела расплав–критический зародыш совпадает с энергией активации самодиффузии при $T > T_g$, рассчитанной ранее для этой же модели на основе анализа кинетики среднеквадратичного смещения атомов [33].

Удовлетворительное совпадение теоретической кривой с результатами компьютерного эксперимента (рис. 1) в области температур $T > T_g$, где перколяционный кластер из взаимопроникающих и контактирующих между собой икосаэдров не образуется, и существенное расхождение этих результатов в области температур $T < T_g$, где процессу кристаллизации обязательно предшествует образование такого кластера, свидетельствуют о существенном влиянии икосаэдрической субструктуры на подвижность атомов и как следствие на время изотермического отжига до начала процесса гомогенной нуклеации.

Список литературы

- [1] M.H. Cohen, G.S. Grest. Phys. Rev. B **20**, 3, 1077 (1979).
- [2] S.-P. Chen, T. Egami, V. Vitek. Phys. Rev. B **37**, 5, 2440 (1988).
- [3] N.N. Medvedev, A. Geiger, W. Brostow. J. Chem. Phys. **93**, 11, 8337 (1990).
- [4] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, Е.В. Левченко. Письма в ЖЭТФ **76**, 2, 115 (2002).
- [5] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, Е.В. Левченко. ЖЭТФ **126**, 3, 600 (2004).
- [6] T. Kitamura. Phys. Rep. **383**, 1, 1 (2003).

- [7] М.И. Ожован. Письма в ЖЭТФ **79**, 12, 769 (2004).
- [8] F. Spaepen. Nature (London) **408**, 6814, 781 (2000).
- [9] D. Turnbull. K. Appl. Phys. **21**, 10, 1022 (1950).
- [10] F.C. Frank. Proc. R. Soc. London A **215**, 43 (1952).
- [11] H. Reichert, O. Klein, H. Dosch, M. Denk, V. Honkimaki, T. Lippmann, G. Reiter. Nature (London) **408**, 6814, 839 (2000).
- [12] T. Schenk, D. Holland-Moritz, V. Simonet, R. Bellissent, D.M. Herlach. Phys. Rev. Lett. **89**, 7, 075 507 (2002).
- [13] D. Holland-Moritz, T. Schenk, R. Bellissent, V. Simonet, K. Funakoshi, J.M. Merino, T. Buslaps, S. Reutzel. J. Non-Cryst. Sol. **312-314**, 47 (2002).
- [14] A. Di Cicco, A. Trapananti, S. Faggioni. Phys. Rev. Lett. **91**, 13, 135 505 (2003).
- [15] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1982). 529 с.
- [16] R. Zallen. The Physics of Amorphous Solids. John Wiley & Sons, N. Y. (1983). 297 p.
- [17] В.А. Полухин, Н.А. Ватолин. Моделирование аморфных металлов. Наука, М. (1985). 288 с.
- [18] M.P. Allen, D.J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford (1987). 408 p.
- [19] В.А. Лихачев, В.Е. Шудегов. Принципы организации аморфных структур. Изд-во С.-Петербургского ун-та, С.-Петербург (1999). 228 с.
- [20] H.M. Pak, M. Dooyama. J. Fac. Eng., Univ. of Tokio B **30**, 111 (1969).
- [21] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. Наука, М. (1995). 608 с.
- [22] К.Дж. Смитлз. Металлы. Metallurgia, М. (1980). 446 с.
- [23] R. Yamamoto, H. Matsuoka, M. Dooyama. Phys. Stat. Sol. A **45**, 305 (1978).
- [24] Д.К. Белашенко. ФММ **60**, 6, 1076 (1985).
- [25] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов. Расплавы **1**, 55 (1998).
- [26] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов. Расплавы **4**, 82 (2001).
- [27] A.V. Evteev, A.T. Kosilov, E.V. Levchenko. Acta Mat. **51**, 9, 2665 (2003).
- [28] L. Verlet. Phys. Rev. **159**, 1, 98 (1967).
- [29] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, А.В. Миленин. Письма в ЖЭТФ **71**, 5, 294 (2000).
- [30] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, А.В. Миленин. ФТТ **43**, 12, 2187 (2001).
- [31] Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. Ч. 1. Мир, М. (1978). 806 с.
- [32] А.А. Чернов, Е.И. Гиваргизов, Х.С. Багдасаров, В.А. Кузнецов, Л.Н. Демьянец, А.Н. Лобачев. Современная кристаллография. Т. 3. Наука, М. (1980). 407 с.
- [33] А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, Е.В. Левченко, О.Б. Логачев. ЖЭТФ, в печати.