

Рис. 2. Графики радиальной функции распределения кремния: а) жидкого при температуре 2000 К и концентрации $2 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$; б) газообразного при температуре 3000 К и концентрации $1 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$

Таким образом, подобран потенциал, позволяющий описать взаимодействие атомов кремния. Данный потенциал довольно прост в вычислениях и применим к моделированию фазовых переходов кремния.

Литература

1. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982. – 127 с.
2. Химическая энциклопедия / под ред. И.Л. Кнунянц. – М.: Советская энциклопедия, 1990.
3. Борисов С.Ф. Межфазная граница газ – твердое тело: структура, модели, методы исследования: учеб. пособие. – Екатеринбург: Изд-во Урал. госуниверситета, 2001. – 54 с.
4. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. – М.: Мир, 1990. – 211 с.
5. Фейнман Р. Статистическая механика: курс лекций. – М.: Мир, 1975. – 312 с.

Герман Евгений Иванович, аспирант, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Цыдыпов Шулун Балдоржиевич, доктор технических наук, зав. кафедрой общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Парфенов Владимир Николаевич, аспирант, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Гладких Алексей Анатольевич, аспирант, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

German Evgeniy Ivanovich, postgraduate student, department of general physics, Buryat State University.
 Tsydyпов Shulun Baldorzhievich, doctor of engineering, head of department of general physics, Buryat State University.
 Parfyonov Vladimir Nikolaevich, postgraduate student, department of general physics, Buryat State University.
 Gladkih Alexey Anatolievich, postgraduate student, department of general physics, Buryat State University.

УДК 539.213

ФРАГИЛЬНОСТЬ И ПАРАМЕТР ГРЮНАЙЗЕНА НЕОРГАНИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

Е.А. Булыгина, В.П. Етобаева, А.А. Машанов, Д.С. Сандитов

Работы выполнены при финансовой поддержке гранта БГУ «Ведущие научные школы».

У ряда неорганических стекол между фрагильностью – характеристикой вязкости вблизи температуры стеклования и параметром Грюнайзена, являющимся мерой анизотропии колебаний решетки, установлена определенная взаимосвязь. Для расчета параметра Грюнайзена использована формула Беломестных-Теслевой.

Ключевые слова: вязкость, фрагильность, анизотропия, стекла.

FRAGILITY AND THE GRUNEISEN PARAMETER OF NONORGANIC GLASSES

E.A. Bulygina, V.P., Etobaeva, A.A. Mashanov, D.S. Sanditov

A number of inorganic glasses has a link between fragility – characteristic of viscosity near the glass transition temperature – and the Gruneisen parameter, which is a measure of anharmonicity of lattice vibrations, established some. To calculate the Gruneisen parameter the Belomestnykh-Tesleva formula is used.

Keywords: viscosity, fragility, anharmonicity, glass.

Анжел [1] ввел понятие фрагильности, которая оказалась удобным способом классификации стекол. Она определяется тангесом угла наклона касательной к кривой вязкости в координатах $\lg \eta - (T_g/T)$ при температуре стеклования T_g :

$$m = \frac{\partial \lg \eta}{\partial (T_g / T)}_{T=T_g} \tag{1}$$

В последние годы появились работы, посвященные установлению связи фрагильности с механическими и тепловыми свойствами стекол [2-4], в частности, с ангармонизмом колебаний решетки, мерой которого служит параметр Грюнайзена γ [4]. Величина γ вычислялась с помощью формулы, выражающей γ через коэффициент Пуассона μ [5]:

$$\gamma \approx 0.7 \frac{(1 + \mu)}{(1 - 2\mu)} \tag{2}$$

Это соотношение получено с использованием ряда приближений.

Беломестных и Теслева [6] более строгим методом вывели формулу, связывающую эти две величины:

$$\gamma = \frac{3}{2} \frac{(1 + \mu)}{(2 - 3\mu)} \tag{3}$$

В выражениях (2) и (3) заметно отличаются знаменатели. Представляет интерес использование (3) вместо (2) в зависимостях, рассмотренных ранее [4].

В настоящей работе с привлечением формулы Беломестных–Теслевой (3) исследована зависимость фрагильности от параметра Грюнайзена для ряда стекол.

Теоретические предпосылки. Ранее было установлено [4], что фрагильность является однозначной функцией доли флуктуационного объема f_g , замороженной при температуре стеклования T_g :

$$f_g = \left(\frac{\Delta V_e}{V} \right)_{T=T_g}, \quad m = \frac{\ln(1/f_g)}{f_g} \tag{4}$$

Флуктуационный объем аморфных сред ΔV_e обусловлен предельными смещениями кинетических единиц из равновесных положений [7]

$$\Delta V_e = N_e (\pi d^2 \Delta r_m) \frac{1}{3\gamma} \tag{5}$$

и, как видно, обратно пропорционален параметру Грюнайзена: $\Delta V_e \sim 1/\gamma$. Здесь N_e – число возбужденных кинетических единиц, πd^2 – эффективная площадь сечения частицы, Δr_m – критическое смещение кинетической единицы, соответствующее максимуму силы межатомного (межмолекулярного) притяжения.

Из соотношений (4)–(5) следует, что при $\ln(1/f_g) \approx \text{const}$ и $\Delta r_m \approx \text{const}$ в первом приближении фрагильность должна быть пропорциональна параметру Грюнайзена: $m \sim \gamma$.

Сравнение с экспериментальными данными. С целью проверки существования взаимосвязи между величинами m и γ мы построим графики зависимости в координатах $m - \gamma$, где для γ использована формула Беломестных–Теслевой (3). Фрагильность определялась по соотношению (1) на основе данных о вязкости $\eta(T)$. Результаты приведены на рисунках 1-5. Используются данные справочника [8].

У силикатных стекол PbO-SiO_2 и $\text{Na}_2\text{O-GeO}_2\text{-SiO}_2$ наблюдается линейная зависимость $m = m(\gamma)$, что согласуется с предположением $m \sim \gamma$ (рис. 1 и 2). У свинцовосиликатных стекол точки «ложатся» на прямую с заметным разбросом. Тем не менее можно принять, что в первом приближении величина m линейно растет с повышением ангармонизма γ .

У натриевоборатных стекол линейное возрастание фрагильности с ростом параметра Грюнайзена обнаруживается при содержании Na_2O выше 20 мол.% (рис. 3). В интервале от 2,8 до 17,5 мол.%

Na₂O с ростом содержания окиси натрия параметр Грюнайзена (ангармонизм) падает с $\gamma \approx 1/7$ до $\gamma \approx 1,45$, а хрупкость растет с $m \approx 35$ до $m \approx 60$.

У боратных стекол Bi₂O₃-B₂O₃ обнаруживается примерно такая же тенденция, что и у натриево-боратных (рис. 3 и 4).

Натриевогерманатные стекла Na₂O-GeO₂ при сравнительно малых содержаниях Na₂O ведут себя как боратные, а при повышении мол.% Na₂O хрупкость перестает меняться с ростом ангармонизма (рис. 5).

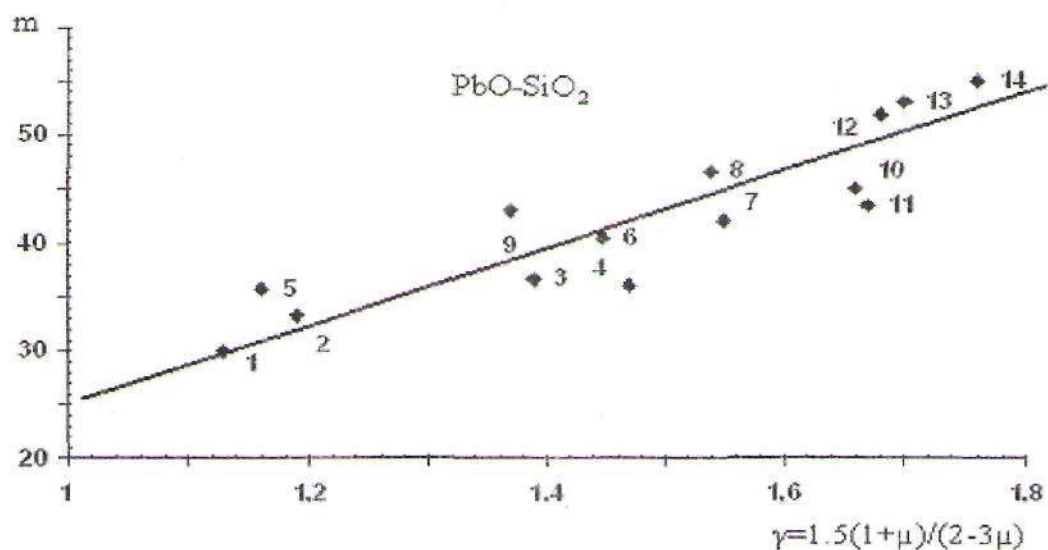


Рис. 1. Зависимость хрупкости свинцовосиликатных стекол m от параметра Грюнайзена γ . Номера точек соответствуют номерам стекол в табл. 1

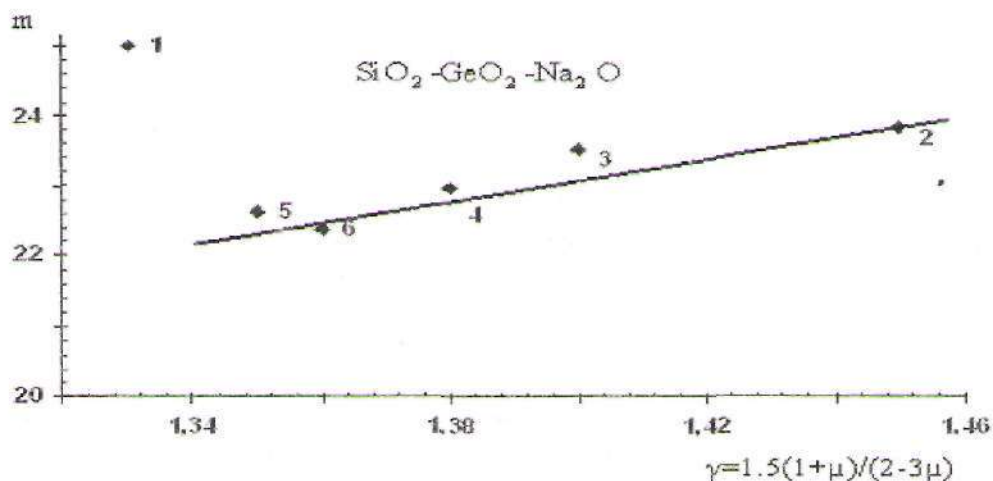


Рис. 2. Зависимость хрупкости от параметра Грюнайзена. Содержание окислов SiO₂/GeO₂/Na₂O, мол. %: 1 – 6.95/85.87/7.17, 2 – 12.11/81.11/6.78, 3 – 15.04/78.41/6.55, 4 – 20.75/73.14/6.11, 5 – 24.68/69.52/5.81, 6 – 27.57/66.85/5.58

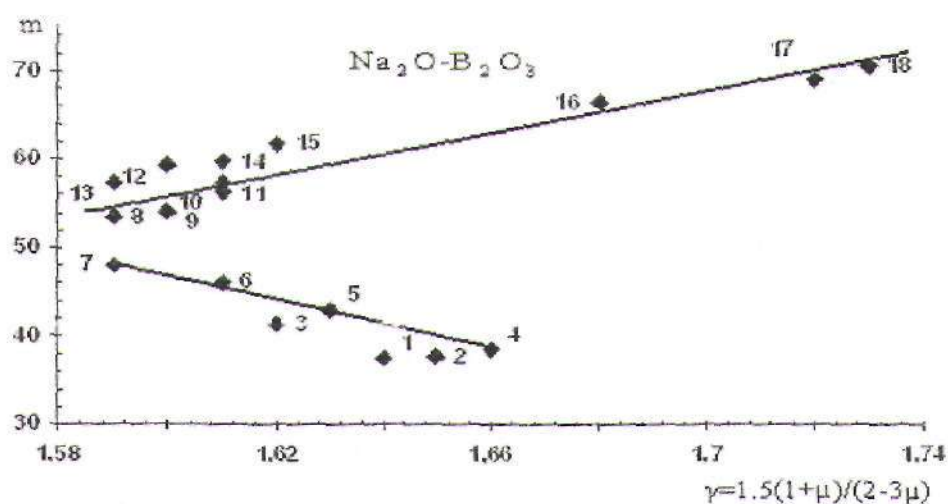


Рис. 3. Зависимость фрагильности натриевоборатных стекол от параметра Грюнайзена. Номера стекол соответствуют номерам стекол в табл. 1

Таблица 1

№	Содержание окисла, мол. %		T_g, K	m	μ	$\gamma (3)$	f_g
	Na_2O	B_2O_3					
1	2.8		565	37.5	0.278	1.64	0.024
2	5.4		571	37.64	0.279	1.65	0.019
3	8		573	41.25	0.274	1.62	0.018
4	10.7		616	38.46	0.281	1.66	0.021
5	13.5		642	42.86	0.276	1.63	0.021
6	15.3		663.5	46	0.271	1.61	0.015
7	17.5		663.5	48	0.268	1.59	0.022
8	19.5		717.5	53.4	0.267	1.59	0.005
9	20.2		717	54.1	0.269	1.6	0.011
10	21.3		727	56.4	0.271	1.61	0.011
11	23.2		733	57.58	0.271	1.61	0.021
12	24.3		733	59.37	0.27	1.6	0.021
13	25.9		734.5	57.5	0.267	1.59	0.016
14	27.4		739	62.5	0.271	1.61	0.019
15	29.8		737.5	64	0.274	1.62	0.021
16	32.6		739.5	68.4	0.285	1.68	0.021
17	35.4		739	69.1	0.291	1.72	0.021
18	38.5		733.5	70.58	0.293	1.73	0.019
№	PbO		T_g, K	m	μ	$\gamma (3)$	f_g
		SiO_2					
1	20		808	37.5	0.156	1.13	0.023
2	30		765	37.64	0.174	1.19	0.02
3	33.3		749	41.25	0.225	1.39	0.019
4	35		746	38.46	0.243	1.47	0.014
5	40.1		728	42.86	0.164	1.16	0.015
6	42.1		702	46	0.219	1.36	0.012
7	45		697	48	0.24	1.45	0.023
8	48		675	53.4	0.261	1.55	0.013
9	49.6		675	54.1	0.259	1.54	0.019
10	50		673	56.4	0.222	1.37	0.008
11	55		646	57.58	0.281	1.66	0.005
12	60		640	59.37	0.282	1.67	0.002
13	63		632	57.5	0.285	1.68	0.004
14	66		618	62.5	0.289	1.7	0.017
15	66.6		619	64	0.294	1.74	0.016
16	68		627	68.4	0.298	1.76	0.009
17	70		627	69.1	0.156	1.15	0.026
18	73		606	70.58	0.174	1.2	-0.09

Введение в SiO_2 как щелочных компонентов (Na_2O), так и окиси свинца PbO приводит к разрыву мостиковых связей Si-O-Si . Атомы свинца легко поляризуются и, несмотря на то, что свинец входит в структуру стеклообразной кремнекислородной сетки, его связи не являются прочными [9]. При большом содержании PbO свинец в силикатных стеклах образует цепочечно увязанные структурные единицы. Этим объясняется рост γ и m при росте PbO (рис. 1), а также зависимость $m(\gamma)$ (рис. 2).

В некоторых боратных системах при некотором введении второго компонента до 20 мол.% Na_2O тугоплавкость возрастает, растет хрупкость, затем, при дальнейшем повышении содержания Na_2O , происходит увеличение координации бора с 3 до 4 [9], что приводит к росту ангармонизма и хрупкости (рис. 3). В силикатах координационное число кремния остается постоянным. В германантных системах при введении окиси натрия координационное число растет с 4 до 6 [9]. Этим можно объяснить резкое изменение зависимости $m(\gamma)$ у натриевогермантных стекол при содержании Na_2O около 20 мол.% (рис. 5).

Таким образом, приведенные данные позволяют сделать вывод, что хрупкость неорганических стекол определенным образом взаимосвязана с ангармонизмом колебаний решетки и нелинейностью сил межатомного взаимодействия, мерой которого служит параметр Грюнайзена.

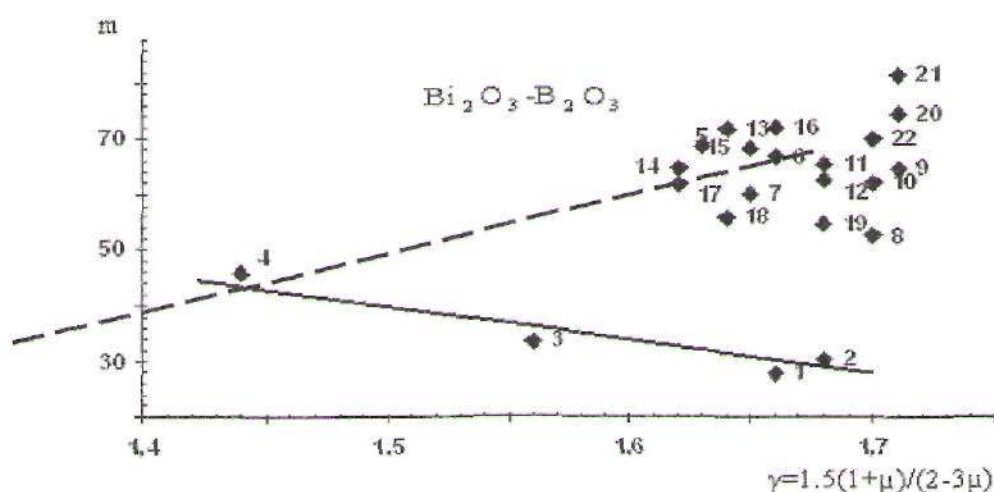


Рис. 4. Зависимость хрупкости стекол $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$ от параметра Грюнайзена. Содержание Bi_2O_3 , мол. %: 1 – 2, 2 – 5, 3 – 7.5, 4 – 10, 5 – 12.5, 6 – 14.60, 7 – 17, 8 – 18.41, 9 – 19.2, 10 – 21, 11 – 25.58, 12 – 28, 13 – 31, 14 – 33.2, 15 – 35.01, 16 – 37.8, 17 – 42.02, 18 – 44.65, 19 – 48.05, 20 – 50.24, 21 – 52.21, 22 – 56.81

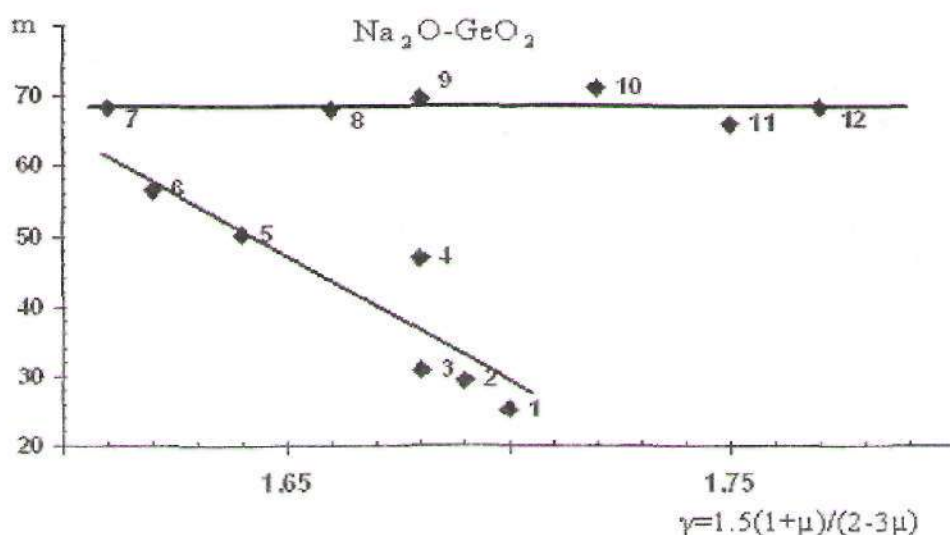


Рис. 5. Зависимость хрупкости натриевогерманантных стекол от параметра Грюнайзена. Содержание Na_2O мол. %: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 3, 4 – 5, 5 – 10, 6 – 13, 7 – 17, 8 – 25, 9 – 27.5, 10 – 30, 11 – 32.5, 12 – 35

Литература

1. Angell C.A. Perspective on the glass transition // J. Phys. Chem. Solids. – 1988. – V.49, №8. – P. 836-871.
2. Nemilov S.V. Structural aspect of possible interrelation between fragility (length) of glass forming melts and Poisson's ratio of glasses // J. Phys. Chem. Solids. – 1988. – V.49, №8. – P. 836-871.
3. Novikov V.N., Sokolov A.P. Poisson's ratio and the fragility of glass-forming liquids // Nature. – 2004. – T.431. – P. 961-963.
4. Сандитов Д.С., Мангатов В.В. О преобразовании уравнения Грюнайзера применительно к стеклующимся системам // Физика и химия стекла. – 1991. – Т.17, №1. – С. 174-179.
5. Сандитов Д.С., Машанов А.А., Сандитов Б.Д., Мангатов В.В. Фрагильность и ангармонизм колебаний решетки стеклообразующих систем // Физика и химия стекла. – 2008. – Т.34, №4. – С. 512-517.
6. Беломестных В.Н., Теслева Е.И. Взаимосвязь ангармонизма и поперечной деформации квазиниотропных поликристаллических тел // Журнал технической физики. – 2004. – Т.74, вып.8. – С. 140-142.
7. Сандитов Д.С. Модуль возбужденного состояния и элементарный акт процесса растяжения стеклообразных твердых тел // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т.137, вып.1. – С. 108-121.
8. Sciglass G.G. Institute of Theoretical Chemistry. – MA. USA. – 2006. – 132 p.
9. Немилос С.В., Романова Н.В. Сравнительное изучение вязкости и структуры стекол силикатных, боратных и германатных систем // Стеклообразное состояние. – Л.: Наука, 1971. – С. 284-289.

Булыгина Елена Александровна, аспирант, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Етобаева Вероника Павловна, студентка, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Машанов Алексей Алексеевич, кандидат технических наук, старший преподаватель, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Сандитов Дамба Сангалиевич, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Bulygina Elena Alexandrovna, postgraduate student, department of general physics, Buryat State University.

Etoabaeva Veronika Pavlovna, student, Buryat State University.

Mashanov Alexey Alexeevich, candidate of engineering, senior lecturer, department of general physics, Buryat State University.

Sanditov Damba Sangadievich, doctor of physics and mathematics, professor, department of general physics, Buryat State University.

УДК 550.372

ГРАДИЕНТНОЕ ШИРОКОПОЛОСНОЕ ПОГЛОЩАЮЩЕЕ ПОКРЫТИЕ

А.Г. Гантимуров, Ю.Б. Башкуев

Описан сравнительно простой поглотитель на основе бездисперсионной среды.

Ключевые слова: поглощающее покрытие, бездисперсионная среда.

GRADIENT WIDE-STRIPED ABSORBING COATING

A.G. Gantimurov, Yu.B. Bashkuev

A comparatively simple absorber on the basis of non-dispersive medium is described.

Keywords: absorbing coating, non-dispersive medium.

В [1, 2] рассматривается бездисперсионный согласующий слой, т.е. слой, в котором скорость электромагнитной волны не зависит от частоты с зависимостью $\varepsilon(z) = \varepsilon_H / (z+a)^4$. В данной статье предполагается использовать его для создания широкополосного согласования с вакуумом в высокочастотном диапазоне волн. Допустим, что мы имеем среду с зависимостью $\varepsilon(z) = \varepsilon_H / (z-a)^4$, $a>0$. Тогда, согласно [2], электрическая компонента запишется как

$$E = C_1 (z-a) e^{\frac{j\omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_H}}{(z-a)}} + C_2 (z-a) e^{-\frac{j\omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_H}}{(z-a)}} \quad (1)$$

Первый член отвечает прямой волне, зависимость от времени предполагается $e^{-j\omega t}$.

Допустим, что данный слой нагружен при $z = a$ на нулевой по импедансу слой, тогда в решении (1) будет отсутствовать обратная волна. Найдем теперь импеданс данного слоя при $z = 0$.