

УДК 539.213

doi: 10.18.101/978-5-9793-0883-8-145-146

Модель делокализованных атомов и ее приложения в физике стеклообразного состояния

Д. С. Сандитов^{1,2}

¹Бурятский государственный университет, 670000, Россия,
г. Улан-Удэ, ул. Смолина 24а, e-mail: Mashanov@bsu.ru

²Институт физического материаловедения СО РАН, 670047, Россия,
г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6, e-mail: Sanditov@bsu.ru

Model of Delocalized Atoms and its Applications in Physics Glassy State

D. S. Sanditov^{1,2}

¹Department of Physics and Engineering, Buryat State University,
Smolin Str., 24a, Ulan-Ude 670000, Russia, e-mail: Mashanov@bsu.ru

²Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
Sakhyanova Str., 6, Ulan-Ude 670047, Russian, e-mail: Sanditov@bsu.ru

1. Элементарным актом ряда молекулярно-кинетических процессов в жидкостях и стеклах служит предельная упругая деформация межатомной (межмолекулярной) связи Δr_m , которая обусловлена флуктуационным смещением кинетической единицы Δr_m , из равновесного положения. Кинетическая единица, испытывающая критическое смещение Δr_m – делокализацию, названа делокализованным атомом, а сам подход – моделью делокализованных атомов [1, 2].

Эта модель может быть использована при интерпретации свободного объема [3, 4], перехода жидкость – стекло, при трактовке температурной зависимости вязкости стеклообразующей жидкости, пластичности стекол, нелинейности силы межатомного взаимодействия (ангармонизма).

2. Температурная зависимость вязкости стеклообразующих жидкостей.

Развито представление о том, что в своеобразной температурной зависимости вязкости тугоплавких стеклообразующих расплавов решающую роль играет локальная низкоактивационная деформация сетки валентных связей, которая служит необходимым условием реализации основного акта процесса вязкого течения этих систем – переключения мостиковой валентной связи (перескока мостикового атома) по Мюллеру – Немиллову.

Локальная низкоактивационная деформация структурной сетки у кинетической единицы, ответственной за текучесть, может быть описана в рамках рассматриваемой модели.

Получено следующее уравнение вязкости стеклообразующих расплавов

$$\eta = \eta_0 \exp \left[\frac{\Delta F_\infty}{RT} + \left[\exp \left(\frac{\Delta \varepsilon_e}{RT} - 1 \right) \right] \right],$$

где ΔF_∞ – высокотемпературный предел свободной энергии активации вязкого течения, $\Delta \varepsilon_e$ – энергия делокализации атома, η_0 – предэкспоненциальный множитель (значение η при $T \rightarrow \infty$), R – газовая постоянная.

Показано, что это уравнение находится в согласии с экспериментальными данными [5, 6].

3. Переход жидкость – стекло.

Замораживание процесса делокализации кинетической единицы – «пускового механизма» текучести – приводит к прекращению вязкого течения и переходу расплава в стеклообразное состояние. Этот момент наступает тогда, когда энергия тепловых колебаний решетки, отнесенная к кинетической единице, становится равной или меньше энергии ее делокализации, откуда следует определенный критерий перехода жидкость – стекло.

Дано обоснование взаимосвязи времени структурной релаксации и скорости охлаждения расплава. Соотношение между ними играет решающую роль в процессе стеклования. Получено обобщенное уравнение для зависимости температуры стеклования от скорости охлаждения [7-10].

4. Эффект пластичности стекол.

Под действием больших механических напряжений при 20⁰С (при температурах ниже температуры стеклования) у неорганических стекол возникает неупругая деформация, которая после снятия

внешнего напряжения может сохраняться сколь угодно долго. Такую деформацию стали называть пластической [11]. Пластичность силикатных стекол наблюдается при микровдавливании алмазной пирамидки Виккерса, при растяжении тонкой стеклянной нити, а также при одноосном сжатии. Представление о том, что элементарный акт пластической деформации стекол сводится к делокализации атома – его критическому смещению, находится в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными: расчеты предела текучести, энергии активации и других характеристик этой деформации согласуются с экспериментом.

Линейная корреляция между пределом текучести (пластичности) стекол и температурой их размягчения объясняется общностью молекулярного механизма этих процессов [12].

5. Ангармонизм колебаний решетки и делокализация атома в аморфных полимерах и стеклах.

Делокализация атома сводится к его значительному (критическому) смещению Δr_m из равновесного положения, при котором ярко проявляется ангармонизм колебаний решетки и нелинейность силы межатомного притяжения, мерой которого служит параметр Грюнайзена γ_D . Поэтому следует ожидать взаимосвязь между величиной γ_D и параметрами модели делокализованных атомов, в частности, долей флуктуационного объема f_g , замороженной при температуре стеклования T_g . Флуктуационный объем обусловлен критическими тепловыми смещениями кинетических единиц, т.е. делокализацией атомов.

В самом деле, установлено, что существует линейная корреляция между долей флуктуационного объема f_g и параметром Грюнайзена γ_D для аморфных органических полимеров и неорганических стекол: чем сильнее выражен ангармонизм колебаний решетки, тем больше доля флуктуационного объема [13]. Дается обоснование взаимосвязи между коэффициентом Пуассона и параметром Грюнайзена [14].

Литература

1. Сандитов Д.С. Модель делокализованных атомов в физике стеклообразного состояния // ЖЭТФ. 2012. Т.142. Вып. 1(7). С. 123-137.
2. Сандитов Д.С., Бадмаев С.С. Делокализация атома в стеклах и их расплавах // Физ. и хим. стекла. 2015. Т.40. №5. С. 621-630.
3. Сандитов Д.С. Свободный объем аморфных веществ в модели делокализованных атомов // ДАН. 2015. Т.464. №6. С. 705-708.
4. Sanditov D.S., Sydykov B.S. Free volume of amorphous solids in the model of delocalized atoms // Physics and chemistry of Glasses: European Journal of Glass Science and Technology. Part B. 2014. V.55. N2. P. 97-102.
5. Сандитов Д.С., Мункуева С.Б. Температурная зависимость вязкого течения стеклообразующих расплавов в широком интервале температур // Физ. и хим. стекла. 2016. Т.42. №2. С. 191-199.
6. Sanditov D.S. Deformation-activation model of viscous flow of glass-forming liquids // Journal of Non-Crystalline Solids. 2014. V.400. P. 12-20.
7. Сандитов Д.С. Переход жидкость-стекло в модели делокализованных атомов // ДАН. 2015. Т.461. №5. С. 542-545.
8. Сандитов Д.С. О природе уравнения перехода жидкость-стекло // ЖЭТФ. 2016. Т.150. Вып. 3(9). С. 501-515.
9. Сандитов Д.С., Сыдыков Б.С. Время структурной релаксации и скорость охлаждения расплава в области стеклования // Журн. физ. химии. 2015. Т.89. №3. С. 420-425.
10. Сандитов Д.С., Сангадиев С.Ш., Дармаев М.В. Температура стеклования и скорость охлаждения стеклообразующих расплавов // ФТТ. 2016. Т.58. Вып.10. С. 2005-2007.
11. Сандитов Д.С., Бартенев Г.М. Физические свойства неупорядоченных структур. Новосибирск: Наука, 1982. 259 с.
12. Сандитов Д.С., Сангадиев С.Ш. Пластичность и вязкость стеклообразных материалов // Деформация и разрушение материалов. 2013. №3. С. 2-7.
13. Сандитов Д.С., Сангадиев С.Ш. Параметр Грюнайзена и флуктуационный объем аморфных полимеров и стекол // Физ. и хим. стекла. 2013. Т.39. №4. С. 553-564.
14. Сандитов Д.С. О природе коэффициента Пуассона органических аморфных полимеров и неорганических стекол // Высокомолек. соед. Серия А. 2016. Т.58. №5. С. 484-499.

Сведения об авторе

Сандитов Дамба Сангадиевич, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей физики, Бурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а, e-mail: sanditov@bsu.ru

Sanditov Damba Sangadievich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of General Physics, Buryat State University, 670000, Ulan-Ude, Smolin Str., 24a, Ulan-Ude 670000, Russia, e-mail: sanditov@bsu.ru