

ПОСТРОЕНИЕ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ НАТРИЕВО-СИЛИКАТНОГО СТЕКЛА

В данной работе была построена и исследована решеточная модель $Na_2O-2SiO_2$ стекла.

In this paper $Na_2O-2SiO_2$ glass model structure was researched.

Исследование структуры и свойств силикатных стекол привлекает в последние годы повышенное внимание как с теоретической, так и с прикладной точки зрения. Большое количество приборов, применяемых в атомной энергетике (волоконно-оптические датчики, системы для передачи изображения из ядерных установок и др.) и космическом приборостроении (иллюминаторы, призмы, линзы), изготовлено из кварцевых стекол [1]. Радиационные дефекты, генерируемые в стеклах под действием ионизирующего излучения, оказывают существенное влияние на оптические свойства [2]. Воздействие высокоэнергетических излучений [4] применяется для эффективного изменения оптических свойств натриево-силикатных стекол, которые широко используются в оптике и промышленности [3, 4]. В работе [1] приводятся данные исследования воздействия потока γ -квантов на оптические свойства натриево-силикатных стекол. Прямые экспериментальные методы, использующие дифракцию рентгеновских лучей, ядерный магнитный резонанс, ИК-спектроскопия и другие физические исследования дают важную информацию о строении и свойствах стекол. Но на сегодняшний день большое значение уделяют построению теоретических моделей неупорядоченных систем с использованием моделирования на ЭВМ. Даже для хорошо изученных стеклообразных систем компьютерное моделирование может как дополнить уже известную структуру, так и предложить метод для проверки различных моделей и предположений. В частности, такая модель позволит изучить радиационные свойства облученных стекол без экспериментального изучения.

Целью данной работы является построение геометрической модели натриево-силикатного стекла с помощью программы Diamond 3.

Diamond 3 – современный пакет программ, позволяющий визуализировать кристаллическую структуру на атомном уровне. Она предлагает широкий набор функций, которые дают возможность легко моделировать произвольные части кристаллической структуры с базовым набором структурных параметров (ячейка, пространственная группа, атомные позиции).

Общий алгоритм работы с программой:

1. Задание геометрической структуры и элементного состава моделируемой системы.
2. Задание общих параметров моделирования.
3. Задание дополнительных физических характеристик.
4. Визуализация и анализ физических характеристик.

Моделирование начинается с формирования исходной конфигурации атомов. Для этого необходимо определить геометрическую структуру исследуемого вещества. $Na_2O-2SiO_2$ имеет следующий оксидный состав: $Na_2O=34,04\%$, $SiO_2=65,96\%$. Дисиликат натрия высокотемпературной формы относится к ромбической сингонии. Пространственная группа P/cnb , $Z=4$ [5] (рис. 1).

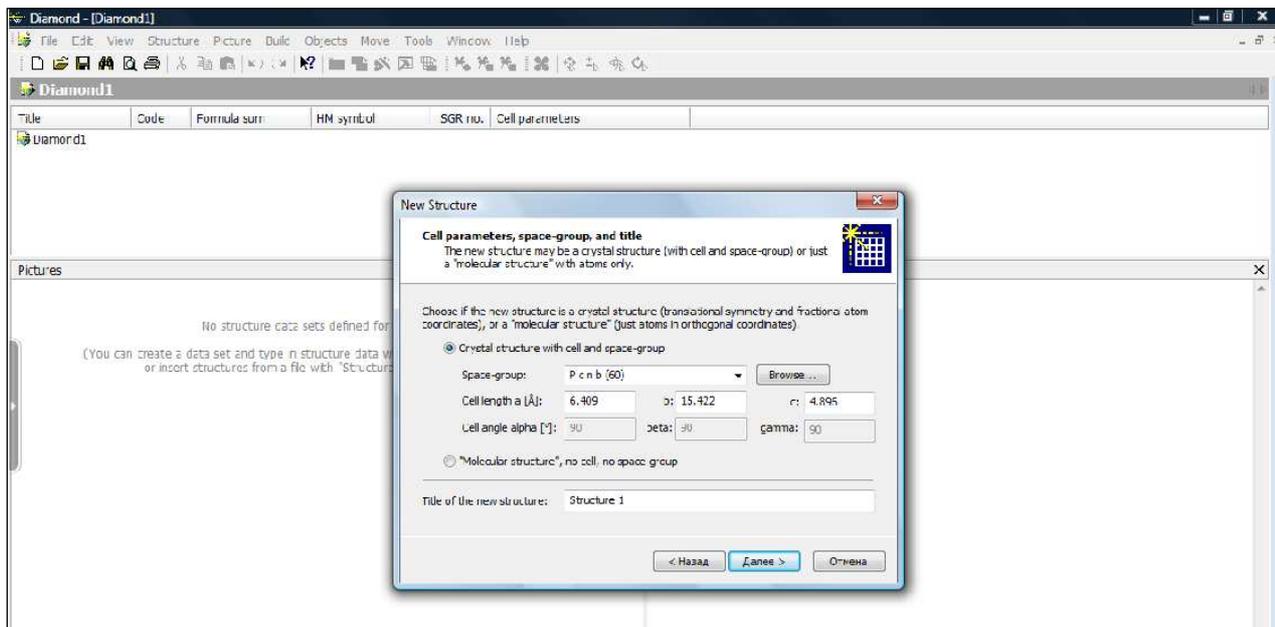


Рис. 1. Задание пространственной группы и параметров элементарной ячейки $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$.

Число атомов модели выбирается, исходя из возможностей компьютера. В нашей работе рассматривается простейший случай, когда конфигурация полностью характеризуется координатами точек, в которых расположены центры атомов. Эти точки при получении исходной конфигурации разбрасываются случайным образом. В данном случае сложность заключается в том, что стекло является аморфным веществом, не имеющим строгой упорядоченной структуры. Для выполнения этого условия ячейка стекла будет включать около 70-100 атомов (в отличие от кристаллов, структура которых может быть построена при использовании до 10 атомов). При построении ячейки натриево-силикатного стекла использовались координаты составляющих атомов из кристаллографической базы данных для минералов и их структурных аналогов [5] (рис. 3).

Исходная структура ячейки получается автоматически в ходе работы алгоритма и определяется взаимодействием атомов (рис. 4).

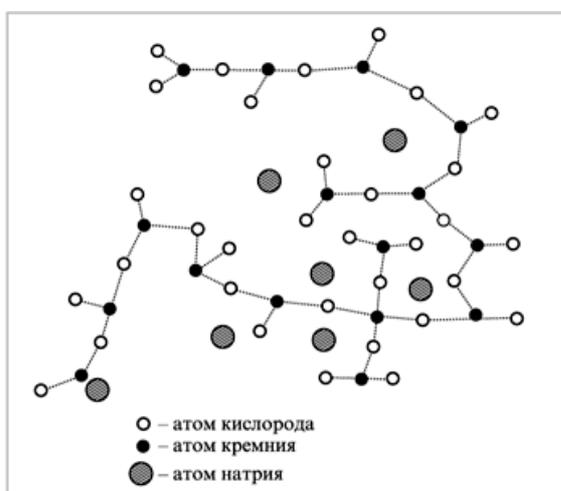


Рис. 2. Задание координат атомов $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{SiO}_2$.

В данной структуре атом кремния находится в центре тетраэдра SiO_4 и связан с четырьмя атомами кислорода. Соединяются кремнекислородные тетраэдры вершинами, через мостиковый ион кислорода. При введении Na_2O происходит беспорядочное разрушение трехмерной структуры в результате разрыва связей $-\text{Si}-\text{O}-\text{Si}-$ и образования связи $-\text{Si}-\text{O}-$, с немостиковыми атомами кислорода (рис. 2).

Следствием этого является возникновение связей немостиковых атомов кислорода с ионами щелочных металлов, заполняющими микропустоты кремнекислородной сетки. Жесткость кремнекислородного каркаса объясняет отсутствие связей ионов натрия с мостиковыми атомами кислорода [6].

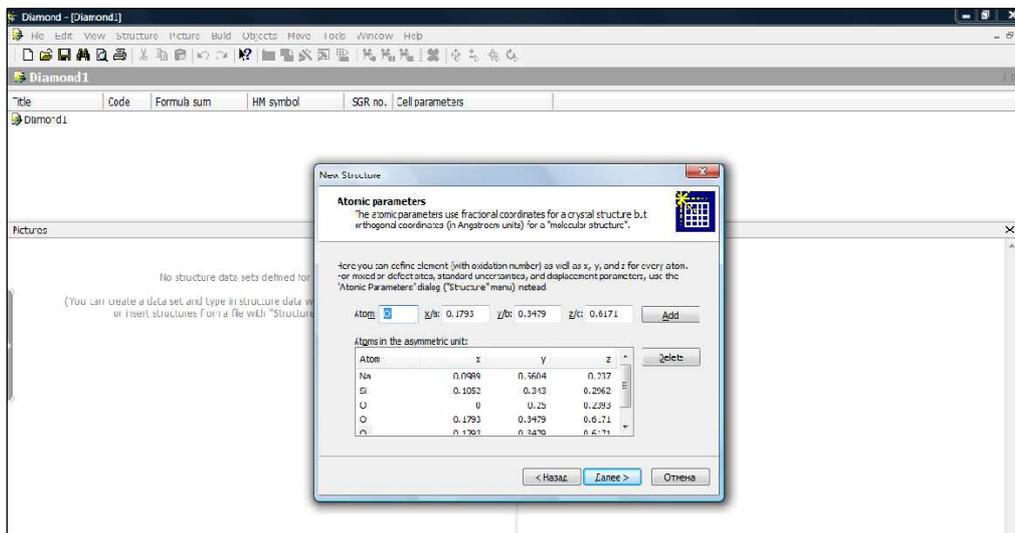


Рис. 3. Схематическое изображение на плоскости строения натриево-силикатного стекла.

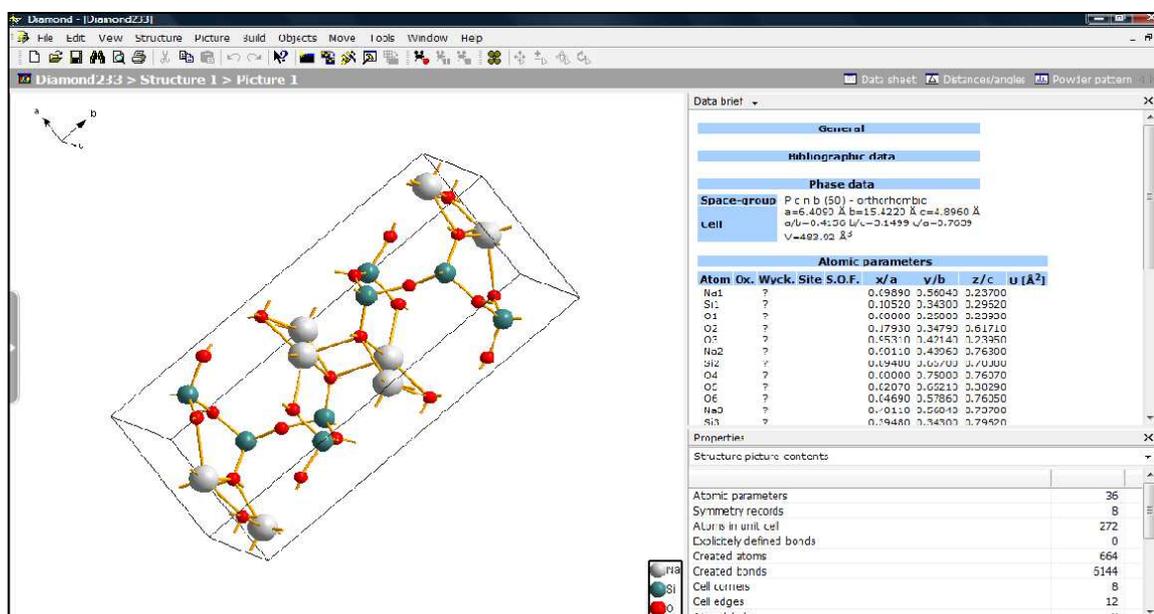


Рис. 4. Фрагмент решеточной модели $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$.

С помощью графического интерфейса пакета Diamant 3, который позволяет генерировать входные данные и быстро визуализировать эти данные, была построена ячейка структурной модели натриево-силикатного стекла.

1. Ванина, Е.А., Чибисова, М.А., Чибисов, А.Н. Влияние γ -излучения на оптические свойства натриево-силикатных стекол // Письма в ЖТФ. – 2007. – Т. 33, вып. 33. – С. 81-86.
2. Акишин, А.И., Цепляев, Л.И. Радиационные-оптические свойства стекол, применяемых в космосе // Физика и химия материалов. – 2006. – № 2. – С. 25-30.
3. Kowal, T.M., Krajczyk, L., Macalik, B., Nierzewski, K., Okuno, E., Suszynska, M., Szmida, M., Yoshimura, E.M. Some effects of γ -irradiation in soda-lime silicate glasses // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2000. – P. 490-494.
4. Jiawei, Sheng, Kohei, Kadono, Yasushi, Utagawa, Tetsuo, Yazawa. X-ray irradiation on the soda-lime container glass // Applied Radiation and Isotopes 56. – 2002. – P. 621-626.
5. WWW-МИНКРИСТ [Электронный ресурс]. URL: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php>. (дата обращения декабрь 2011 – март 2012 г.).

6. Пух, В.П., Байкова, Л.Г., Киреенко, М.Ф., Тихонова, Л.В., Казанникова, Т.П., Синани, А.Б. Атомная структура и свойства неорганических стекол // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47, вып. 3. – С. 850-855.