

УДК 539.213

doi: 10.18101/2306-2363-2017-1-37-40

ФРАГИЛЬНОСТЬ И ПАРАМЕТР УРАВНЕНИЯ СТЕКЛОВАНИЯ

© Машанов А. А.

кандидат технических наук, доцент, кафедра общей физики,
Бурятский государственный университет
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
E-mail: mashanov@bsu.ru

© Сандитов Д. С.

доктор физико-математических наук, профессор,
Бурятский государственный университет
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
E-mail: sanditov@bsu.ru

Установлена взаимосвязь между фрагильностью (m), температурой стеклования (T_g) и полосой температур (δT_g), характеризующей температурный интервал перехода жидкость-стекло. Величина δT_g является параметром уравнения стеклования $q\tau_g = \delta T_g$ (q — скорость охлаждения расплава, τ_g — время релаксации при температуре стеклования). Показано, что у стекол одного класса, у которых $m = \text{const}$, наблюдается линейная корреляция между δT_g и T_g .

Ключевые слова: фрагильность, стекло, температура стеклования, уравнение ВЛФ (Вильямса-Ландела-Ферри), переход жидкость-стекло, время релаксации, скорость охлаждения расплава.

Настоящее сообщение посвящено установлению взаимосвязи параметра уравнения стеклования δT_g с фрагильностью m и проверке наличия линейной корреляции между величиной δT_g и температурой стеклования T_g .

В последние десятилетия получило распространение понятие о фрагильности стекол m , которая определяется температурной зависимостью вязкости $\eta(T)$ вблизи температуры стеклования T_g [1-4]

$$m = \left. \frac{d \ln \eta(T)}{d(T_g/T)} \right|_{T=T_g} . \quad (1)$$

Легко убедиться, что подстановка зависимости $\eta(T)$ из известного уравнения ВЛФ [5] в это выражение приводит к соотношению [2]

$$m = \frac{C_1}{C_2} T_g ,$$

где C_1 и C_2 — параметры уравнения ВЛФ. Через эти параметры выражается параметр уравнения $\delta T_g = C_2/C_1$, характеризующий область перехода от жидкости к стеклу в процессе охлаждения стеклообразующих расплавов [6]. Из равенства (2) с учетом $\delta T_g = C_2/C_1$ при $m = \text{const}$ у стекол одного класса вытекает линейная корреляция между δT_g и температурой стеклования T_g

$$\delta T_g = \left(\frac{1}{m} \right) T_g , \quad (3)$$

что подтверждается экспериментальными данными (рис. 1-3).

Величина t используется для классификации стекол [1].

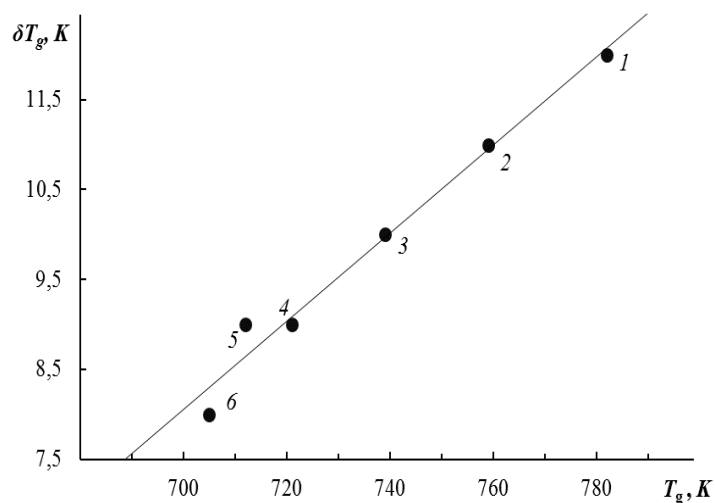


Рис. 1. Линейная корреляция между δT_g и T_g для натриево-силикатных стекол. Содержание Na_2O , мол. %: 1 — 15, 2 — 20, 3 — 25, 4 — 30, 5 — 33, 6 — 35. Используются данные [7].

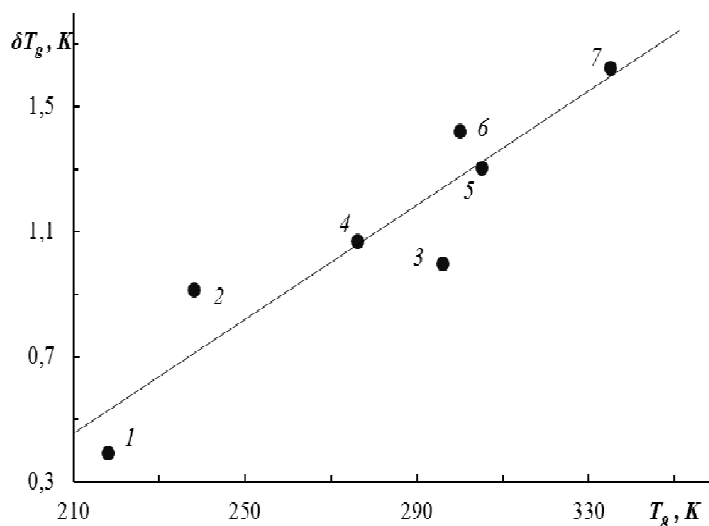


Рис. 2. Линейная корреляция между δT_g и температурой стеклования T_g для аморфных органических полимеров. 1 — полигексен-1, 2 — полиуретан, 3 — поливинилхлорид, 4 — полиметилакрилат, 5 — поливинилацетат, 6 — натуральный каучук, 7 — метакрилат этиловый. Используются данные [5].

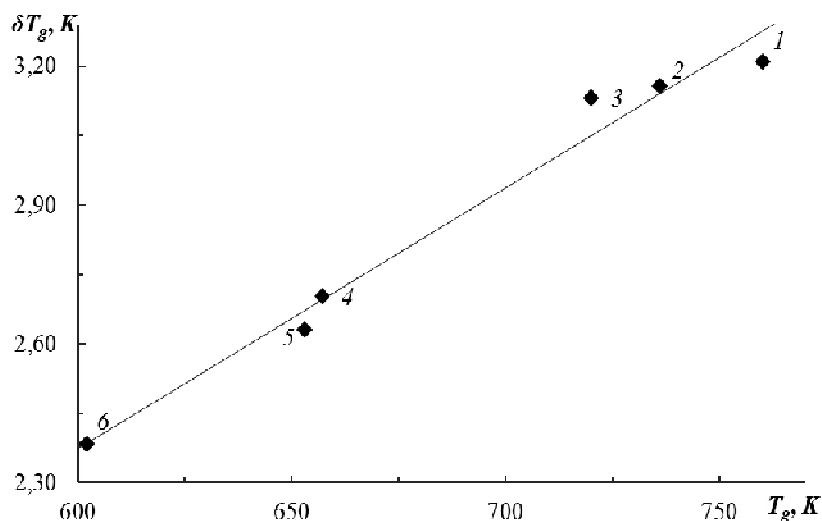


Рис. 3. Корреляция между δT_g и T_g для металлических стекол. Используются данные [8]. 1 — $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$, 2 — $\text{Fe}_{80}\text{P}_{13}\text{C}_7$, 3 — $\text{Fe}_{41.5}\text{Ni}_{41.5}\text{B}_{17}$, 4 — $\text{Pd}_{82}\text{Si}_{18}$, 5 — $\text{Pd}_{77.5}\text{Cu}_6\text{Si}_{16.5}$, 6 — $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{20}$.

Таким образом, параметр уравнения стеклования δT_g линейно зависит от температуры стеклования T_g . Этот результат имеет важное значение при выяснении природы уравнения стеклования $q\tau_g = \delta T_g$. Ранее величина δT_g рассматривалась как константа — коэффициент пропорциональности между q и $1/\tau_g$: чем больше скорость охлаждения q , тем меньше время структурной релаксации τ_g . Полученный результат указывает на тот факт, что δT_g является постоянной величиной только для стекол одного класса, у которых температуры стеклования одинаковы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ (грант № 1932).

Литература

1. Angell C. A. Perspective on the glass transition // J. Phys. Chem. Solids. — 1988. — V. 49, № 8. — P. 836-871.
2. Сандитов Д. С., Машанов А. А., Сандитов Б. Д., Мантатов В. В. Фрагильность и ангармонизм колебаний решетки стеклообразующих систем // Физика и химия стекла. — 2008. — Т. 34, № 4. — С. 512-517.
3. Машанов А. А., Сандитов Д. С. Фрагильность и коэффициент Пуассона неорганических стекол // Вестник Бурятского госуниверситета. Химия. Физика. — 2010. — Вып. 3. — С. 123-127.
4. Булыгина Е. А., Етобаева В. П., Машанов А. А., Сандитов Д. С. Фрагильность и параметр Грюнайзена неорганических стекол // Вестник Бурятского госуниверситета. Химия и Физика. — 2011. — Вып. 3. — С. 259-262.
5. Ферри Дж. Вязкоупругие свойства полимеров. — М.: ИЛ. — 1963. — 535 с.
6. Сандитов Д. С. О природе уравнения перехода жидкость-стекло // ЖЭТФ. — 2016. — Т. 150, Вып. 3(9). — С. 501-515.

7. MDL® SciGlass -7.8. Institute of Theoretical Chemistry, Shrewsbury, MA, – 2012. www.sciglass.info

8. Сандитов Д.С., Дармаев М.В., Сандитов Б.Д. Применение модели делокализованных атомов к металлическим стеклам // ЖТФ. — 2017. — Т. 87, Вып. 1. — С. 43-47.

FRAGILITY AND EQUATION PARAMETERS OF GLASS TRANSITION

Mashanov A. A.

Candidate of Engineering Sciences, associate Professor,
Buryat State University
24a Smolina Str., Ulan-Ude, 670000, Russia
E-mail: mashanov@bsu.ru

Sanditov D. S.

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,
Buryat State University
24a Smolina Str., Ulan-Ude, 670000, Russia
E-mail: sanditov@bsu.ru

The relationship between a fragility (m), glass transition temperature (T_g) and temperature strip (δT_g) characterizing the transition temperature range of liquid- glass. δT_g value is of a parameter of $q\tau_g = \delta T_g$ glass transition equation (q — melt cooling rate, τ_g — relaxation time at the glass transition temperature). It is shown that glasses of the same class, in which $m = \text{const}$, have linear correlation between δT_g and T_g .

Keywords: fragility, glass, glass transition temperature, WLF equation (Williams-Landel-Ferry), liquid-glass transition, relaxation time, melt cooling rate