

Научная статья  
УДК 539.199: 541.64  
DOI 10.18101/2306-2363-2025-1-16-20

### **Определение предэкспоненциального множителя в уравнении вязкости с помощью полинома Лагранжа и кубических сплайнов**

© **Машанов Алексей Алексеевич**

кандидат технических наук, доцент,  
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова  
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а  
Mashanov@bsu.ru.

© **Дармаев Мигмар Владимирович**

кандидат технических наук, доцент,  
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова  
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а;  
Институт физического материаловедения СО РАН  
Россия, 670047, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6,  
darmaev@bsu.ru.

© **Доржизапова Сэсэгма Дондоковна**

преподаватель,  
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова  
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а  
of@bsu.ru

**Аннотация.** В статье исследованы халькогенидные стекла систем Sb-Ge-Se и P-Se-Te с целью определения предэкспоненциального множителя  $\eta_0$  в уравнении вязкости. Использованы два математических метода экстраполяции: интерполяция полинома Лагранжа и кубические сплайны. Эти методы позволили экстраполировать кривую зависимости логарифма вязкости от обратной температуры  $\lg \eta - (1/T)$  в область низких температур, где экспериментальные данные отсутствуют. Результаты показали, что значения  $\lg \eta_0$ , полученные обоими методами, близки друг к другу, что подтверждает надежность использованных подходов. Для стекол системы Sb-Ge-Se значения  $\lg \eta_0$  варьировались от 0,7 до 2,97, а для системы P-Se-Te — от -0,97 до 3,3. Исследование также выявило зависимость предэкспоненциального множителя от природы стекол и подтвердило его связь с активационным объемом  $V_\eta$ , который определяется соотношением свободной энергии активации  $E_\eta$  и модуля сдвига  $G$ . Полученные результаты демонстрируют, что разброс значений  $\eta_0$  обусловлен особенностями структуры аморфных веществ, а не погрешностями метода экстраполяции.

**Ключевые слова:** уравнение вязкости, предэкспоненциальный множитель, полином Лагранжа, кубические сплайны, халькогенидные стекла.

#### **Для цитирования**

Машанов А. А., Дармаев М. В., Доржизапова С. Д. Определение предэкспоненциального множителя в уравнении вязкости с помощью полинома Лагранжа и кубических сплайнов // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2025. Вып. 1. С. 16–20.

### Введение

В общем виде уравнение вязкости обычно записывают следующим образом [1]:

$$\eta = \eta_0 \exp\left(\frac{E_\eta}{RT}\right), \quad (1)$$

где  $E_\eta$  — свободная энергия активации вязкого течения,  $\eta_0$  — предэкспоненциальный множитель, который определяется путем экстраполяции кривой  $\lg\eta$  —  $(1/T)$  к повышенным температурам  $1/T = 0$ .

Принято считать, что предэкспонента  $\eta_0$  слабо зависит от природы жидкостей:  $\eta_0 \approx \text{const}$ . Тем не менее анализ значений  $\eta_0$  для жидкостей различной природы выше температуры плавления показывает, что величина  $\eta_0$  может меняться в значительных пределах  $\eta_0 \approx 10^{-3} \div 10^{-5}$  П [1, 2]. Одна из причин такого разброса может быть связана с погрешностью, обусловленной экстраполяцией кривой вязкости  $\lg\eta$  —  $(1/T)$  на широкий интервал, от  $\lg\eta \approx 1-3$  до  $\lg\eta \approx -5$ . Поэтому при отыскании более надежных значений  $\eta_0$  целесообразно привлекать известные математические методы экстраполяции.

В качестве объектов исследований были взяты халькогенидные стекла состава: Sb-Ge-Se, P-Se-Te. Экспериментальные данные для указанных составов взяли из электронной базы<sup>1</sup>, остановились на этих стеклах в связи с тем, что у них имеются в достаточно широком диапазоне экспериментальные данные о вязкости.

Цель работы — определение предэкспоненты  $\eta_0$  в уравнении вязкости (1) с применением интерполяционной формулы Лагранжа и кубических сплайнов.

### Результаты расчета

Для обработки экспериментальных данных мы использовали пакет прикладных программ Matlab. В нашем случае, чтобы вычислить значения предэкспоненты  $\eta_0$ , необходимо экстраполировать кривую  $\lg\eta - (1/T)$  в область низких температур, для которой отсутствуют экспериментальные данные. Процесс экстраполяции в Matlab реализуется с помощью функции *interp1*, в которой дополнительно указывается метод экстраполяции:

$$y_i = \text{interp1}(x, Y, x_i, \text{method}, \text{extrapval}). \quad (2)$$

В таблице представлены расчетные данные, вычисленные с помощью Matlab. Как видно из таблицы, предэкспонента, полученная интерполяцией полинома Лагранжа, не сильно отклоняется от данных, вычисленных кубическими сплайнами. Это объясняется степенью используемого полинома, так как степень полинома связана с количеством узлов (точек) экспериментальных данных. Полином Лагранжа от 6-й до 8-й степени удовлетворительно описывает кривую  $\lg\eta - 1/T$  в области экстраполяции (где отсутствуют опытные данные) [3; 4].

---

<sup>1</sup> MDL ® SciGlass — 7.8 Institute of Theoretical Chemistry, Shrewsbury, MA, 2012.

Таблица

Сравнение значений логарифма предэкспоненты  
в уравнении вязкости и некоторые другие свойства

Стекло, мол.%			$\lg \eta_0 (II)$		$G,$ $ГПа$	$E_\eta,$ кДж/моль	$V_\eta,$ $\text{Å}^3$
			Лагранж	Сплайны			
Sb	Ge	Se					
14,68	4,38	80,94	1,41	1,29	54	78,6	1,45
14,74	8,89	76,47	1,39	1,38	59	86,8	1,47
21,55	8,57	69,88	1,48	1,47	67	88,8	1,33
14,8	13,24	71,97	2,54	2,97	64	80,9	1,26
28,03	8,36	63,62	2,67	2,95	75	81,4	1,09
21,63	12,9	65,47	2,24	2,36	72	90,5	1,26
14,85	17,72	67,43	0,70	0,73	70	103,4	1,48
34,31	12,28	53,41	2,19	2,49	89	100,6	1,13
28,23	16,84	54,93	2,87	3	85	109,2	1,28
21,8	21,66	56,54	1,87	1,93	84	110,7	1,32
P	Se	Te					
2,92	67	30,08	2,87	3,01	54,9	66,4	1,21
2,41	55,18	42,41	2,31	2,44	60,4	69,6	1,15
6,12	62,38	31,5	1,37	1,32	59,7	81,7	1,37
5	50,95	44,05	2,97	3,3	65,1	75,3	1,16
4,01	40,93	55,06	0,74	0,56	65,9	79,4	1,20
11,09	70,65	18,27	1,15	1,13	49,5	81,0	1,64
9,13	58,16	32,71	1,87	1,95	56,4	77,1	1,37
7,38	47,03	45,6	0,80	0,94	57,1	77,4	1,35
16,73	63,97	19,3	0,90	-0,97	43,9	76,1	1,73

Предэкспонента в уравнении вязкости, хотя и слабо, но зависит от природы стекол. Разброс данных не связан с приближенностью расчета, поскольку использован апробированный математический метод экстраполяции.

Теоретическое значение предэкспоненты в уравнении вязкого течения для различных веществ меняется в небольших пределах, колеблется около среднего значения [1]:

$$\lg \eta_{0T} = \lg \left( \frac{Nh}{V_\eta} \right) \approx -3.5, \quad (3)$$

где  $V_\eta$  — активационный объем вязкого течения,  $h$  — постоянная Планка,  $N$  — число частиц.

Расчетные данные предэкспоненциального множителя с использованием метода экстраполяции у исследованных нами стекол немного превышают значение  $\lg \eta_0$ , полученное по формуле (3). Стекло Sb-Ge-Se:  $\lg \eta_0 \approx - (1,29 - 2,97)$ ; P-Se-Te:  $\lg \eta_0 \approx - (1,13 - 3,01)$  (табл.).

При увеличении количества ионов величина  $\lg \eta_0$  у силикатных стекол уменьшается, что согласуется с представлением о том, что кинетической единицей, участвующей в вязком течении оксидных стекол, является мостиковый ион ки-

слорода в мостике Si – O – Si [1], ибо в соответствии с формулой (3) предэкспонента в уравнении вязкости  $\eta_0$  обратно пропорциональна активационному объему вязкого течения  $\eta_0 \sim (1/V_\eta)$ . В самом деле, как видно из таблицы, величина  $V_\eta$  у исследованных стекол изменяется от содержания окиси. Значение  $V_\eta$  определяется отношением свободной энергии активации при температуре стеклования  $T_g$  к мгновенному модулю сдвига  $G$

$$V_\eta = \frac{E_\eta}{G}, \quad (4)$$

а величина  $E_\eta(T_g)$  — по уравнению вязкости (1) [1]

$$E_\eta(T_g) = 2.3RT_g(\lg \eta_g - \lg \eta_0), \quad (5)$$

где  $\eta_g$  — значение  $\eta$  при  $T = T_g$ . Данные о величинах  $V_\eta$  и  $E_\eta$  приведены в таблице.

### Заключение

Таким образом, обработка экспериментальных данных по температурной зависимости вязкости стекол с привлечением математических методов позволяет определить надежное значение предэкспоненциального множителя  $\eta_0$  в уравнении вязкости.

Разброс значений предэкспоненты в уравнении вязкости обусловлен ее зависимостью от природы аморфных веществ, а не приближенностью способа определения  $\eta_0$ . Полученные данные подтверждают связь  $\eta_0$  с активационным объемом вязкого течения.

### Литература

1. Немилев С. В. Вязкое течение стекол в связи с их структурой. Применение теории скоростей процессов // Физ. и хим. стекла. 1992. Т. 18, № 1. С. 3–44. Текст: непосредственный.
2. Barrer R. M. The viscosity of pure liquids. *Trans. Far. Soc.* 1943; 39(1): 48–67.
3. Уиттекер Э., Робинсон Г. Математическая обработка результатов наблюдений. Ленинград; Москва: Изд-во ГТТИ, 1933. С. 30–35. Текст: непосредственный.
4. Сандитов Д. С., Машанов А. А. Математическая обработка экспериментальных данных по вязкости расплавов стекол в широком интервале температур // Физ. и хим. стекла. 2010. Т. 36, № 1. С. 55–59. Текст: непосредственный.

Статья поступила в редакцию 16.05.2025; одобрена после рецензирования 24.06.2025; принята к публикации 24.06.2025.

Determination of the Pre-Exponential Factor in the Viscosity Equation Using  
the Lagrange Polynomial and Cubic Splines

*Aleksei A. Mashanov*

Cand. Sci. (Engineering), A/Prof.,  
Dorzhi Banzarov Buryat State University  
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia  
Mashanov@bsu.ru

*Migmar V. Darmaev*

Cand. Sci. (Engineering), A/Prof.,  
Dorzhi Banzarov Buryat State University  
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia  
Institute of Physical Material Science SB RAS  
6 Sakhyanovoy St., 670047 Ulan-Ude, Russia  
darmaev@bsu.ru

*Sesegma D. Dorzhizapova*

Lecturer  
Dorzhi Banzarov Buryat State University  
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia  
of@bsu.ru

*Abstract.* The article studies chalcogenide glasses of the Sb-Ge-Se and P-Se-Te systems to determine the pre-exponential factor  $\eta_0$  in the viscosity equation. Two mathematical extrapolation methods were employed: Lagrange polynomial interpolation and cubic splines. These methods enabled the extrapolation of the logarithmic viscosity–inverse temperature dependence curve,  $\lg \eta$  vs.  $(1/T)$ , into the low-temperature region where experimental data are unavailable. The results showed that the  $\lg \eta_0$  values obtained using both methods were in close agreement, confirming the reliability of the approaches used. For the Sb-Ge-Se glass system,  $\lg \eta_0$  values ranged from 0.7 to 2.97, while for the P-Se-Te system, they ranged from  $-0.97$  to 3.3. The article also revealed that the pre-exponential factor depends on the nature of the glass and confirmed its relationship with the activation volume  $V\eta$ , which is defined by the ratio of the activation free energy  $E\eta$  to the shear modulus  $G$ . The findings demonstrate that the variation in  $\eta_0$  values is due to structural characteristics of the amorphous materials rather than inaccuracies in the extrapolation methods.

*Keywords:* viscosity equation, pre-exponential factor, Lagrange polynomial, cubic splines, chalcogenide glasses.

*For citation*

Mashanov A. A., Darmaev M. V., Dorzhizapova S. D. Determination of the Pre-Exponential Factor in the Viscosity Equation Using the Lagrange Polynomial and Cubic Splines. *Bulletin of Buryat State University. Chemistry. Physics.* 2025; 2: 16–20 (in Russ.).

The article was submitted 16.05.2025; approved after reviewing 24.06.2025; accepted for publication 24.06.2025.