

УДК 539.199:541.64

DOI: 10.17223/00213411/62/6/129

Д.С. САНДИТОВ<sup>1,2</sup>, М.В. ДАРМАЕВ<sup>1</sup>

## ЭНЕРГИИ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ АТОМА И ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ В ОБЛАСТИ СТЕКЛОВАНИЯ\*

Между эмпирическим параметром  $D$  уравнения Енкеля для вязкости и температурой стеклования  $T_g$  неорганических стекол установлена линейная корреляция, которая обсуждается в рамках модели делокализованных атомов. Из анализа данной корреляции следует определенная информация о стекловании и вязком течении стеклообразующих жидкостей. Величина  $D$  является однозначной функцией энергии делокализации атома.

**Ключевые слова:** вязкое течение, стеклование, модель, делокализация атома, флуктуационный объем, уравнение состояния, аморфные вещества.

### Введение

Для своеобразной температурной зависимости вязкого течения стеклообразующих жидкостей предложена серия эмпирических соотношений [Vogel–Fulcher–Tamman (1921–1925), Waterton (1932), Jenkel (1939), Bradbury (1951), Шишкин (1956), Cornelissen (1957) и др. [1–7]]. Меерлендер [4] в результате сравнения наиболее распространенных пяти уравнений вязкости с опытными данными приходит к заключению, что уравнение Енкеля [5]

$$\eta = A \exp \left[ \frac{B}{T} + \frac{C}{T} \exp \left( \frac{D}{T} \right) \right] \quad (1)$$

наилучшим образом описывает вязкое течение стеклообразующих жидкостей в широком интервале температур. Обоснованию этого соотношения были посвящены публикации [2, 6, 7].

В настоящем сообщении более детально обсуждается природа постоянной этого уравнения  $D$  в рамках модели делокализованных атомов [8, 9].

### Эмпирический параметр уравнения Енкеля и температура стеклования

Вывод уравнения Енкеля (1) с привлечением развиваемой модели позволяет однозначно связать эмпирический параметр  $D$  с энергией делокализации атома  $\Delta \epsilon_e$  ( $k$  – постоянная Больцмана) [6, 7]:

$$\Delta \epsilon_e = kD. \quad (2)$$

Энергия  $\Delta \epsilon_e$  тесно связана с температурой стеклования  $T_g$  и долей флуктуационного объема  $f_g$ , замороженной в области температуры  $T = T_g$  [8, 9]:

$$\Delta \epsilon_e = kT_g \ln(1/f_g). \quad (3)$$

Величина  $f_g$  определяется по данным о вязкости и сравнительно слабо зависит от природы стеклообразных систем, у аморфных веществ одного класса она практически постоянна [8, 9]:

$$f_g = \left( \frac{\Delta V_e}{V} \right)_{T=T_g} \approx \text{const}.$$

Флуктуационный объем  $\Delta V_e$  обусловлен тепловыми смещениями атомов:  $\Delta V_e = N_e \Delta v_e$ , где  $N_e$  – число делокализованных атомов;  $\Delta v_e$  – элементарный флуктуационный объем, необходимый для делокализации атома – его предельного смещения из равновесного положения. Здесь и далее под «равновесным положением» подразумевается временное равновесное положение, которое равновесно лишь локально.

Расчет  $\Delta \epsilon_e$  по формуле (2) из данных о величине  $D = 2500$  К [4] для силикатного стекла ( $R$  – газовая постоянная) (таблица)

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант № 3.5406.2017/8.9).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>