

УДК 539.194: 666.113  
DOI 10.17223/24135542/9/2

**И.А. Бабина**

*Филиал Военного учебно-научного центра Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина» (г. Челябинск, Россия)*

## **Вероятностные модели с заданными физико-химическими свойствами, используемые для разработки новых технологий изготовления стекол в авиации**

*Приведены энергетические расчеты по строению поверхностно-потенциальной энергии, которые указывают на согласование с теорией перестройки для структуры стекол. Приведены данные по анионному строению расплавов, полученные в модельном эксперименте, основанном на полумпирических и неэмпирических расчетах. Отмечены близость результатов, полученных для двух моделей, и их качественное и количественное соответствие экспериментальным данным. Показана возможность построения вероятностных моделей с учетом особенностей структурообразования оксидных систем с заданными физико-химическими свойствами, используемых для разработки новых технологий изготовления остекления кабин военных и гражданских самолетов и иллюминаторов для орбитальной космической станции посредством модельного эксперимента.*

**Ключевые слова:** *расплавы; модификаторы; квантовохимические расчеты; комплекс; структурные фрагменты; стекла; решеточная модель; модельный эксперимент.*

### **Введение**

Современное авиационное материаловедение, при всем его разнообразии, к современному стеклу предъявляет несколько ключевых требований. Среди них, кроме высокой прочности, – оптическая прозрачность, высокое светопропускание, увеличивающие диапазон визирования, антибликовые свойства, защита от воздействия солнечной радиации и других излучений, антиобледенительные свойства, обеспечивающие равномерное удельное сопротивление электрообогрева. Этот набор свойств позволяет говорить о стекле как о сложной оптической системе, а благодаря высоким прочностным качествам стекла, составляющего часть кабины самолета, была создана новая область науки и техники, введен термин «изделия конструкционной оптики».

Силикатное стекло – материал с уникальными свойствами [1]. Прозрачность, теплостойкость, прочность, возможность использования различных покрытий делают его незаменимым для остекления летательных аппаратов. Последние разработки материаловедов позволили кардинально изменить представление о силикатном стекле как о хрупком материале.

Современные методы упрочнения позволяют придать остеклению современных боевых самолетов прочность, достаточную, чтобы выдержать удар птицы весом около двух килограмм при скорости 900 км/ч. Компания «Сухой» впервые в мире изготовила из силикатного стекла лобовую и откидную часть фонаря самолета Т-50 в формате 3D. Достигнутые результаты дали толчок к оснащению подобным остеклением самолетов других заводов и конструкторских бюро. Сразу же появилась необходимость в модернизации, замене органического остекления на силикатное, например на самолетах Як-130, Су-35, МиГ-31, МиГ-35. После такой замены (т.е. улучшения прочностных характеристик остекления) МиГ-35, к примеру, впервые развил скорость до 2 000 км/ч, т.е. смог лететь быстрее в среднем на 40%, чем любой другой самолет в мире.

В последние десятилетия стеклообразующие неорганические системы на основе традиционных (оксидов кремния, бора, фосфора) и новых стеклообразующих соединений стали предметом повышенного внимания ученых и практиков. Оксидные материалы, содержащие оксид фосфора, являются перспективными для самого разнообразного применения в промышленности, в создании современных наукоемких производств, научных исследованиях [2].

Усилилось углубленное экспериментально-теоретическое изучение зависимости свойств и качеств стекла от его химического состава, что очень важно для поиска условий синтеза новых материалов с заданными свойствами.

Целенаправленный синтез материалов с заданными свойствами может эффективно осуществляться лишь на основе знания процесса их структурообразования, а также связи структуры материалов с их физико-химическими свойствами. При исследовании оксидных систем в решении этой задачи наряду с реальным экспериментом и теоретическими разработками успешно применяется компьютерное моделирование – его уникальной особенностью является возможность прогнозирования и построения вероятностной модели.

Широкое применение нашли молекулярно-статистические модели, основанные на методах Монте-Карло и молекулярной динамики. Данные модели успешно применялись при изучении относительно простых по составу расплавов.

Во многих опубликованных работах по моделированию [3, 4] в основном использован эмпирический подход к описанию межатомного взаимодействия. Применение аналитической формы расчета энергий и определения параметров проводится поверхностно, причем параметры, полученные в различных работах, отличаются весьма значительно, невозможно придать им определенный физический смысл, т.е. модели являются по существу интерполяционными. В них потенциальные функции играют роль корректора при переходе от заданного расположения частиц системы к другим состояниям, получаемым путем изменения термодинамических параметров. Подобный подход принципиально не применим для прогнозирования.

Для прогнозирующего моделирования актуальна задача разработки такого системного подхода, в котором энергии межатомного взаимодействия

определяются до статистического или динамического моделирования и являются независимыми «входными» параметрами. Столь тщательный анализ энергий межатомного взаимодействия связан с тем, что в них заключена вся информация, определяющая специфику (индивидуальность) поведения атомов в модели.

Достоверность прогнозирования структуры и свойств при моделировании определяется корректностью оценки энергий взаимодействия атомов в исследуемой системе. В моделях практически отсутствует возможность оценки погрешности рассчитываемых свойств, т.е. с использованными в расчетах приближениями, подбором объектов и свойств, для определения параметров.

Актуальностью разработки системного подхода к анализу межчастичного взаимодействия в молекулярно-статистических моделях оксидных систем можно считать метод, основанный на кластерных квантовохимических расчетах.

Предложенный и обоснованный в работе [5] подход является достаточным общим и может применяться в исследовании любых объектов с ионно-ковалентным характером связей.

Оптимальный состав оксидных композиций для указанных ниже применений определялся, как следует из анализа ранее опубликованных работ [1, 2], в основном путем подбора. Это объясняется тем, что в связи с трудностями осуществления структурных исследований оксидных материалов в области высоких температур недостаточно установлены взаимосвязи в цепочке состав – структура – свойства.

Эффективность современных научных исследований обусловлена комплексным применением теоретических разработок, натурального эксперимента и численным моделированием на ЭВМ. Стоит отметить, что в области высокотемпературных исследований организация натурального эксперимента весьма сложна, а также имеются специфические сложности и в организации модельного эксперимента. Однако если удастся построить адекватную вероятностную модель, появляется возможность более надежной интерпретации опытных данных, получение дополнительных, более систематичных результатов и более детального описания объекта исследования.

В данной и ранее опубликованных работах [6, 7] значительное внимание уделено изучению взаимосвязи состава и механизма структурообразования в неупорядоченных композициях, содержащих оксид фосфора  $P_2O_5$ . В соответствии с этой целью решались следующие задачи: определение общих закономерностей в строении структурных фрагментов сеткообразующих оксидов по результатам квантовохимических расчетов и выявление статистических закономерностей в анионном составе силикатных и фторфосфатных расплавов с добавками оксида фосфора с использованием метода Монте-Карло. Были вынесены предположения, которые нашли свое отражение в следующих задачах:

1. Доказать, что для оксида фосфора молекулярные модели, построенные из тетраэдров  $PO_4^{3-}$ , хорошо воспроизводят экспериментальные значе-

ния геометрических параметров ближнего порядка и основные характеристики электронной структуры.

2. Утвердить предположение, что, с точки зрения квантовохимических расчетов, общими для этих, а также молекулярных моделей оксида кремния и бора являются стабильность значений длин и порядков связей, одинаковость свойств  $X-O_M$ -связей с общим атомом мостикового кислорода. Ввиду постоянства зарядов атомов  $X$  и мостикового кислорода энергия этих моделей с высокой точностью может быть представлена в аддитивном приближении.

3. Выяснить, возможны ли различные механизмы структурных изменений, вызванные добавками оксида фосфора в силикатные расплавы, которые определяются оксидом-модификатором. В результате формируется либо микронеоднородная структура из силикатных и фосфатных областей (для оксида лития, натрия, кальция), либо происходит растворение атомов фосфора в силикатной сетке (для оксида магния).

4. Убедиться, что на примере фторфосфатных расплавов возможно построение неэмпирической модели, которая сможет давать такую же информацию об анионном строении, как и прецизионный натуральный эксперимент. При этом для высокомолекулярных ионов модельный эксперимент может дать более детальное описание, чем натуральный, и поспособствует интерпретации полученных опытных данных.

В литературных обзорах ранее опубликованных работ были представлены особенности строения и физико-химических свойств фосфорсодержащих стекол и расплавов и указаны перспективные направления для разработки новых фосфатных материалов. Проведенный анализ методов модельного исследования показал, что для решения поставленных задач, с учетом специфики выбранных объектов, наиболее адекватным является метод Монте-Карло в сочетании с решеточной моделью, структурные фрагменты которой анализируются методами квантовой химии.

### **Экспериментальная часть**

В кластерном приближении полуэмпирическим и неэмпирическим методами квантовой химии были рассчитаны геометрические характеристики, распределение электронной плотности и формирование энергетических электронных зон для структурных фрагментов оксидов фосфора, кремния и бора. И установлено, что, так же как для оксидов бора и кремния, линейные модели оксида фосфора с граничными атомами водорода характеризуются достаточно стабильными значениями длин и порядков связей, а также перераспределением заряда в цепочке  $P-O-P$ .

В качестве примера в табл. 1 приведены характеристики линейных моделей оксида фосфора с граничными атомами водорода. Видно, что в группе линейных моделей, содержащих от 2 до 8 атомов фосфора, практически не меняются средняя длина и средний порядок  $P-O_M(P)$  связей. Это же касается зарядов атомов фосфора и мостикового кислорода.  $P-O$  связи с

общим мостиковым кислородом одинаковы как по длине, так и по порядку связи. Полная энергия этих моделей с отклонением не более 0,0023% может быть представлена в аддитивном приближении.

Таблица 1

**Характеристики моделей линейных структурных фрагментов-цепочек оксида фосфора с граничными атомами водорода**

Число атомов в модели	$E \cdot 10^{-18}$ Дж	Погрешность аддитивного расчета $\gamma \% \cdot 10^{-2}$	$\langle L \rangle$ , Å	Средний порядок Р (Р) $P-O_M-(P)$	Максимальная асимметрия длин / порядков	Заряды атомов		
						Р	$O_M$	$O_d$
1	215,832	—						
2	379,58	0,16	1,659	0,591	$\frac{1,001}{0,01}$	2,27	-1,072	-0,861
3	543,34	0,13	1,666	0,581	$\frac{1,011}{0,081}$	2,30	-1,092	-0,857
4	707,12	0,015	1,665	0,582	$\frac{1,013}{1,034}$	2,33	-1,092	-0,86
5	870,88	0,17	1,663	0,584	$\frac{1,015}{1,091}$	2,34	-1,091	-0,863
6	1034,67	0,015	1,664	0,586	$\frac{1,021}{1,118}$	2,35	-1,088	-0,872
7	1198,47	0,23	1,662	0,585	$\frac{1,023}{1,149}$	2,36	-1,091	-0,872
8	1362,2	0,12	1,662	0,585	$\frac{1,018}{1,112}$	2,33	-1,092	-0,873

Замена граничных атомов водорода на атомы лития приводит к ряду заметных изменений. Длина связи Р–О–(Р) возрастет, разброс ее значений увеличится:  $L = 1,715 \pm 0,009$ . Соответственно средний порядок связи уменьшается, а его разброс существенно увеличивается:  $\langle P_{cp} \rangle = 0,56 \pm 0,01$ .

В ходе исследования было установлено, что изменяется и перераспределение электронной плотности между атомами: заряд на атомах фосфора в среднем возрастает и составляет  $2,27 \pm 0,05$ ; заряд на мостиковом атоме кислорода убывает:  $q_{om} = -0,986 \pm 0,009$ ;  $q_{od} = 0,846 \pm 0,01$  также убывает. Наиболее заметны изменения, связанные с симметрией соседних (с общим  $O_M$ ) связей. Критерий асимметричности по длине связи возрастает до 1,17, а по порядкам связей (даже если не учитывать связи на концах цепочек) достигает 1,43. Сопоставление данных для линейных фрагментов трех оксидов кремния, бора, фосфора показывает, что в данном ряду длина связей возрастает, а ее порядок, соответственно, убывает. В этом же ряду увеличивается перераспределение заряда в цепочке Х–О–Х, т.е. возрастает вклад ионной составляющей в энергию связи. Асимметрия длин и порядков связей с общим  $O_M$  возрастает в ряду оксидов кремния, бора, фосфора. Таким образом, сеткообразующая способность оксида фосфора по всем этим характеристикам должна быть меньше, чем для оксида кремния и бора.

Дополнительно к этому были исследованы молекулярные модели фрагментов, образованных совместно связями Si–O–Si, Si–O–P, P–O–P. В результате установлены следующие закономерности: заряд на мостиковом атоме кислорода в цепочке P–O<sub>M</sub>–Si равен среднему значению зарядов мостиковых атомов из цепочек Si–O<sub>M</sub>–Si и P–O<sub>M</sub>–P. То же выполняется и для суммы порядков сопряженных связей. При этом происходит «смещение» мостикового атома кислорода в сторону атома фосфора (длина связи Si–O<sub>M</sub>–(P) возрастает, а длина связи P–O<sub>M</sub>–(Si) убывает).

Для иллюстрации смешанной цепочки, образованной атомами Si и P, на рис. 1 приведен конкретный пример – это сшивание связью двух цепочек Si–O–P из Si–O–Si и P–O–P.

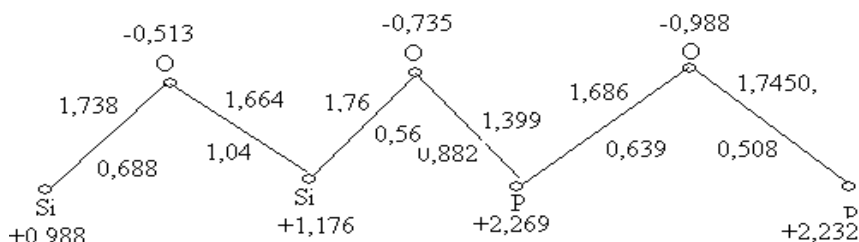
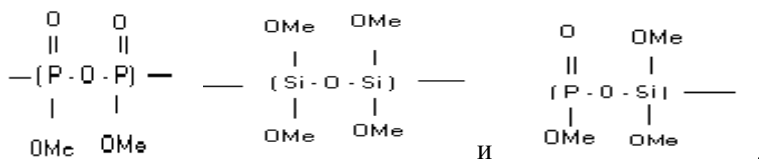


Рис. 1. Характеристики каркасных связей модели состава  $(PO)_2Si_2(OLi)_8$

Проведена энергетическая оценка процессов структурообразования в оксидах, содержащих оксид фосфора. Она показала, что на поверхностях потенциальных энергий имеются достаточно выраженные минимумы, отвечающие линейным цепочкам, содержащим следующие фрагменты:



где Me = Li, Na, H.

Полученные в этих расчетах значения полной энергии позволяют сопоставить глубину минимумов для цепочек различной длины и различного состава.

В качестве «нулевой» оценки относительной стабильности структур рассчитывались разности глубин минимумов для гипотетических реакций структурообразования, в результате которых происходит образование мостиковых связей и в последующем увеличивается длина цепочки. Подобные реакции рассматривались также для P–O–P цепочек и для линейных структур, содержащих фрагменты P–O–P, Si–O–Si, Si–O–P. Расчет соответствует T = 0 K.

Реакции первого типа моделируют первый этап полимеризации – образование димеров. Для моделей с граничными атомами водорода, участву-

ющих в этих реакциях, были проведены расчеты (ab-initio) с базами STO-3G и расчеты полуэмпирическим методом PM3. Результаты этих расчетов обобщены в табл. 2.

Таблица 2

Энергетический эффект ( $\Delta E$ , Ккал/моль) образования мостиковых связей в моделях с граничными атомами водорода ( $M_e = H$ )

Метод расчета	Значение энергетического эффекта ( $\Delta E$ , Ккал/моль)	
	PM3	ab-initio (STO-3G)
Si–O–Si	5,99	5,36
P–O–P	6,04	17,78
P–O–Si	7,14	18,62

Отметим, что в подтверждение положений теории перестройки Ван-Везера энергетический эффект, рассчитанный двумя способами, оказался небольшим. Кроме того, в зависимости от рода оксида модификатора, соотношение в энергетических эффектах образования связей P–O–P, Si–O–Si, Si–O–P может изменяться различным образом.

В сопоставлении рассмотрены формирование электронной структуры для индивидуальных оксидов фосфора и кремния, а также изменение энергетического спектра при их смешении. Для оксида фосфора и кремния области расположения валентных зон близки и вид кривой плотностей состояния (рис. 2, 3) сходен.

При образовании совместных фрагментов структуры из тетраэдра  $Si(OH)_4$  и  $PO(OH)_3$  происходит формирование общей валентной зоны, однако при этом не образуются связывающие молекулярные орбитали, общие для всей цепочки X–O–X-связей.

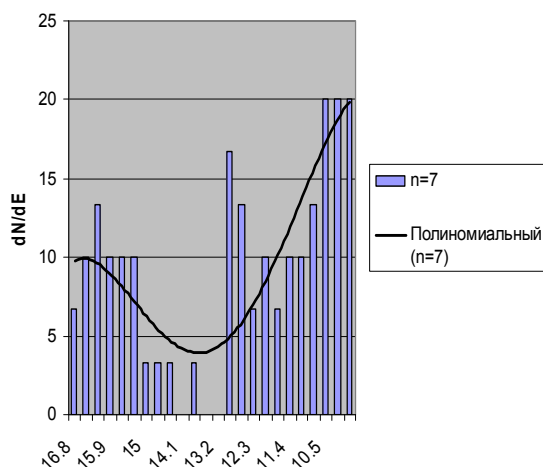


Рис. 2. Гистограммы плотности состояний в валентной квазизоне линейных фрагментов структуры  $Si_nO_{3n+1}H_{2n+2}$  (линия тренда – полином 7-й степени)

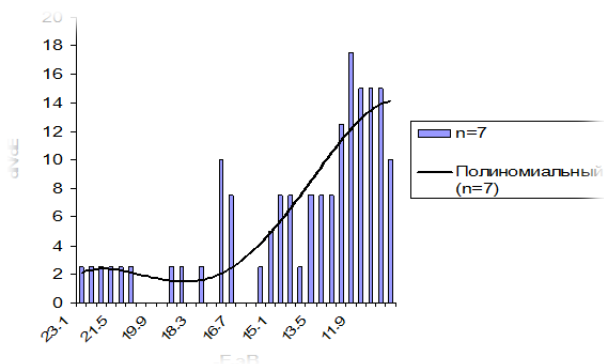


Рис. 3. Гистограммы плотности состояний в валентной квазизоне линейных фрагментов структуры  $P_2O_5$  с семью атомами фосфора (линия тренда – полином 7-й степени)

Было исследовано влияние добавок оксида фосфора на структуру силикатных расплавов  $SiO_2-P_2O_5-Me_2X$  в решеточной модели. В связи с важностью корректной оценки полной энергии решеточной модели в начале моделирования проведена более детальная проработка аддитивного метода расчета.

Объектом для квантовохимических расчетов в кластерном приближении является молекулярная модель фрагмента структуры исследуемого вещества. Такая модель может содержать до сотен атомов. Для исследования закономерностей структурообразования в системах на основе оксидов сеткообразователей оксида кремния и фосфора изучено порядка 100 молекулярных моделей с каркасом из Si–O–Si, P–O–P, Si–O–P связей.

На этих моделях определялась точность аддитивного расчета полной энергии решеточной модели. Полагалось, что полная энергия каждой модели может быть представлена в виде

$$F_n = \sum_{i=1}^k C_{in} \varepsilon_i,$$

где  $n = 1, 2 \dots N$  ( $N$  – общее число моделей);  $i = 1, 2 \dots k$  ( $k$  – число возможных видов связей);  $\varepsilon_i$  – энергия, соответствующая связи с номером.

Для нахождения численных значений  $\varepsilon_i$  по результатам квантовохимических расчетов использовалась следующая оптимизационная процедура. Была составлена целевая функция  $Y$  в виде разницы между энергиями  $E_n$ , полученными в независимом квантовохимическом расчете для каждой модели, и энергиями, представленными в виде суммы вкладов, соответствующих определенным типам связей:

$$Y = \sum_{n=1}^N (F_n(\varepsilon_i) - E_n)^2.$$

Далее был найден минимум целевой функции при заданных начальных значениях  $\varepsilon_i(0)$  и заданных интервалах их варьирования. По завершении



расчетов на печать были выведены оптимизированные значения  $\varepsilon_i$ , целевая функция  $Y$ , а также абсолютные и относительные погрешности аддитивного расчета  $Y_n$  для каждой из моделей.

В проведенном исследовании проверялось влияние на точность аддитивного приближения следующих факторов: начальные значения и границы поиска; общее число моделей ( $N$ ) при заданном химическом составе; тип связей, которым приписывались фиксированные значения  $\varepsilon_i$ ; выбор квантовохимического метода расчета, химического состава моделируемой системы.

### Результаты и их обсуждение

Достаточно двух-трех последовательных уточнений начальных значений и границ поиска, чтобы при неизменных данных, использованных для оптимизации, прийти к однозначному результату по значениям  $\varepsilon_i$ ,  $Y_n$  и  $Y$ .

При заданном химическом составе результаты оптимизационной процедуры зависят от того, какие модели и какое их число  $N$  используется при нахождении  $k$ -значений  $\varepsilon_i$ . Необходимое число моделей определялось следующим образом:  $N_1$  моделей включалось в оптимизационную процедуру. Для них определялись относительные погрешности,  $Y_n$  ( $n = 1, 2 \dots N_1$ ) и отношение  $Y_1/N_1$ . Проверка показала, что существенное превышение какого-либо значения  $Y_m$  над остальными свидетельствует о том, что при квантовохимическом расчете для моделей с номером  $m$  не был достигнут наиболее глубокий минимум ППЭ. Для таких моделей проводились повторные квантовохимические расчеты.

Далее по полученным значениям  $\varepsilon_i$  находились относительные погрешности  $Y_\alpha$  для нескольких ( $\approx 5$ ) моделей, не задействованных в оптимизационной процедуре. Если значения  $Y_\alpha$  существенно превышали наибольшее из значений  $Y_n$ , то размер базы моделей для оптимизации увеличивался до  $N_2$ . Вновь определялись значения  $Y_2/N_2$  и  $Y_n$  ( $n = 1, 2 \dots N_2$ ) и т.д. Увеличение базы моделей прекращалось при достижении условий

$$\frac{Y_v}{N_v} = \frac{Y_{v-1}}{N_{v-1}} \text{ и } \max Y_v \text{ (} v = 1, 2 \dots N_v \text{) одного порядка с } \max Y_\alpha.$$

Расчеты показали, что для трехкомпонентных систем типа  $P_2O_5-SiO_2-Na_2O$  и  $P_2O_5-SiO_2-Li_2O$  для получения оптимизированных трехцентровых вкладов в полную энергию необходимо было  $\approx 16$  моделей. При этом максимальная погрешность составляет ( $Y_n \approx 0,07\%$ ).

Объединение указанных моделей в одну базу, которая будет представлять четырехкомпонентную систему (например,  $P_2O_5-SiO_2-Na_2O-Li_2O$ ), приводит к возрастанию целевой функции на 13%. Как следует из данных, приведенных в табл. 3, изменение величины самих энергетических вкладов при изменении состава системы не превышает 0,1%.

Энергетические вклады  $\varepsilon_i \cdot 10^{-18}$  Дж, соответствующие трехцентровым связям (расчет методом РМ-3)

№	Связь	Моделируемая система			Среднее значение
		P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> -Na <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> -Li <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> -SiO <sub>2</sub> -Na <sub>2</sub> O-Li <sub>2</sub> O	
1	Si-O-Na	51,262	–	51,270	51,266
2	P-O-Na	70,674	–	76,680	70,677
3	Si-O-P	72,691	72,756	72,705	72,717
4	P-O-P	91,941	91,882	91,920	91,894
5	Si-O-Si	53,682	53,576	53,632	53,630
6	Si-O-Li	–	51,293	51,290	51,291
7	P-O-Li	–	70,642	70,628	70,635

Таким образом, при усложнении состава моделируемой системы SiO<sub>2</sub>-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-Na<sub>2</sub>O точность предложенного алгоритма расчета энергии несколько уменьшается, но в то же время остается достаточно высокой для выбранных объектов исследования.

Сопоставлением установлено, что представление полной энергии одних и тех же моделей в виде суммы энергетических вкладов, соответствующих трехцентровым связям типа Si-O-Si, Na-O-Na, P-O-Si, всегда на порядок точнее, чем аналогичное суммирование по двухцентровым связям типа Si-O, P-O, P=O и др.

При моделировании методом МК ранее установлено, что введение небольшого количества оксида фосфора существенно изменяет структуру расплавов системы SiO<sub>2</sub>-MgO. Для проверки общности данного факта нами изучено влияние добавок оксида фосфора (до  $x = 15$  мол. %) на структуру SiO<sub>2</sub>-Li<sub>2</sub>O, SiO<sub>2</sub>-Na<sub>2</sub>O, SiO<sub>2</sub>-MgO, SiO<sub>2</sub>-CaO.

### Заключение

Таким образом, были уточнены закономерности формирования электронного энергетического спектра для линейных молекулярных моделей, образованных связями X-O-X<sup>1</sup> (X, X<sup>1</sup> = Si, P). Установлен механизм влияния оксида-модификатора на ситуацию структурообразования при добавлении оксида фосфора в силикатные расплавы. А значит, показана возможность построения вероятных адекватных неэмпирических моделей структуры расплавов, с экспериментальной точностью воспроизводящих анионный состав.

### Литература

1. Шелби Дж. Структура, свойства и технология стекла. М. : Мир, 2006. 288 с.
2. Лазерные фосфатные стекла / Н.Е. Алексеев, В.П. Гапонцев, М.Е. Жаботинский и др. М. : Наука, 1980. 352 с.
3. Бухтояров О.И. Исследование оксидных расплавов методом Монте-Карло // Известия АН СССР. Металлы. 1991. № 4. С. 124–129.

4. Сигал Дж. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М. : Мир, 1980. Т. 1. 327 с.
5. Borgianni G., Granati P. Monte-Karlo calculation of ionic structure in silicate and aluminosilicate melts // *Met. Trans. B.* 1979. V. 108B, № 1. P. 21–25.
6. Бабина И.А., Воронцов Б.С. Энергетическая оценка процессов структурообразования в оксидах, содержащих  $P_2O_5$  // *Научное обозрение.* 2005. № 6. С. 47–53.
7. Бабина И.А., Воронцов Б.С. Алгоритм расчета энергии для моделирования методом Монте-Карло оксидов на основе  $P_2O_5$  // VI Международная конференция «Компьютерное моделирование 2005». СПб., 2005. С. 189–202.

**Информация об авторе:**

**Бабина Инга Александровна**, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры математики и естественно-научных дисциплин, техники и технологии в металлургии филиала Федерального государственного казенного военного образовательного учреждения высшего образования «Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина» Министерства обороны Российской Федерации (г. Челябинск, Россия). E-mail: babina\_inga@mail.ru

*Tomsk State University Journal of Chemistry*, 2017, 9, 15-26. DOI: 10.17223/24135542/9/2

---

**I.A. Babina**

*The Branch of the Military Educational and Scientific Center of the Air Force "The Air Force Academy named after Professor N.Ye. Zhukovsky and Yu.A. Gagarin" (Chelyabinsk, Russian Federation)*

**Probabilistic models with desired physical and chemical properties used to develop new technologies for glass production in aviation**

*The article shows the energy calculations on the structure of the potential surface energy (PES), which indicate agreement with the theory of restructuring for the structure of glass. Data is given on the anion structure of melts in the modeling experiment, based on semi-empirical and ab initio calculations. It notes the closeness of the results obtained for the two models and their qualitative and quantitative agreement with experimental data. By means of a model experiment, the possibility is shown of constructing probabilistic models, taking into account particularities of structure formation of oxide systems with given physical-chemical properties used for the development of new production technologies of glass cockpits of civil and military aircraft and illuminators for orbital space stations.*

**Keywords:** *Melt modifiers, quantum chemical calculations, complex, structural fragments, glass, lattice model systems, model experiment.*

**References**

1. Shelby, John. Structure, properties, and technology of glass. M.: Mir, 2006; P.288.
2. Alekseev N.E., Gapontsev V.P., Jabotinsky M.E. Laser phosphate glass. M.: Nauka, 1980; P.352.
3. Bukhtoyarov O.I. Study of oxide melts by Monte Carlo simulation. *Proceedings of the USSR Academy of Sciences. Metals.* 1991;4:124–129.
4. Semi-empirical methods of calculation of the electronic structure. V.1; TRANS. with eng. M.: Mir, 1980; P.345.
5. Borgianni G., Granati P. Monte-Karlo calculation of ionic structure in silicate and aluminosilicate melts. *Met.Trans.B.* 1979;108(1):21–25.

6. Babina I.A., Vorontsov B.S. Energy evaluation of the processes of structure formation in oxides containing. *Journal Scientific review*. 2005;6:47–53.
7. Babina I.A., Vorontsov B.S. Energy evaluation of the processes of structure formation in oxides containing. *Journal Scientific review*. 2005;6:47–53.
8. Babina I.A., Vorontsov B.S. The Algorithm of calculation of energy for simulations using the Monte-Carlo oxides on the basis of. *VI international conference "Computer simulation of 2005"*. 2005;189–202.

**Information about the author:**

**Babina Inga A.**, Candidate of the Physico-Mathematical Sciences Department of Mathematics and Natural Sciences (Chelyabinsk, Russian Federation). E-mail: babina\_inga@mail.ru