

ХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ СТЕКОЛ

Н.М. Ведищева

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург

В докладе будет показано, что рассмотрение стекол в рамках концепции химического строения позволяет объяснить природу экспериментально наблюдаемых изменений свойств и структуры стекол при изменении состава или температуры, что не всегда возможно сделать на базе результатов исследования. Концепция базируется на строгой термодинамической модели ассоциированных растворов и применима к системам любой компонентности, образованным оксидами с различной химической природой. Этот подход рассматривает стекла как растворы, компонентами которых являются продукты взаимодействия оксидов, называемые химическими группировками. В модели соблюдается принцип минимальной свободной энергии системы, в соответствии с которым предполагается стехиометрическое и структурное подобие химических группировок и кристаллических соединений, существующих в рассматриваемой системе. Модель не требует использования подгоночных параметров и позволяет установить равновесные концентрации группировок как функции состава стекол (расплавов), что и определяет их химическое строение. Эта информация является основой для строгого расчета свойств стекол и их структуры, а также для установления их количественной связи.

Коренное отличие этой концепции от моделей, описанных в литературе, состоит в том, что структура и свойства стекол рассчитываются на базе аналогичных сведений о кристаллических соединениях, образующихся в рассматриваемой системе. Никаких данных для изучаемых стекол не требуется. Именно поэтому концепция химического строения обладает предсказательной способностью, а сама процедура расчета структуры и свойств является моделированием (modelling), а не слепым поиском полинома, который мог бы описать экспериментальные данные (simulation). Последний термин относится ко всем известным в настоящее время теоретическим подходам.

Будут приведены примеры интерпретации, в рамках концепции, литературных результатов исследований свойств и структуры стекол. Также будет предложен анализ качества некоторых статей, опубликованных в зарубежных высокорейтинговых журналах и написанных авторами с высокими личными рейтингами.