

УДК 517.958

© 2015 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,
О.В. Жилиндина, канд. техн. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

КИБЕРНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ КОРДИЕРИТОВОЙ КЕРАМИКИ*

Рассматривается утилитарная методика расчета частотных характеристик упругой электронной поляризации конденсированных материалов. Приведены результаты компьютерного моделирования оптимизированных оптических спектров ряда чистых кристаллических оксидов, а также вытекающие спектральные свойства композиционного образца, синтезируемого на их основе.

Ключевые слова: комплексная диэлектрическая проницаемость, оптический показатель преломления, вычислительный эксперимент.

Введение

Кордиеритовая керамика находит все большее применение для изготовления электроизоляционных изделий, работающих в условиях резких перепадов температур. Ее исходные компоненты представляют твердые растворы как чисто магниевых веществ, так и чисто железистых химических соединений.

Наряду с кордиеритами, в рассматриваемой керамике содержится ряд кристаллических фаз – муллит ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$), корунд (Al_2O_3), кварц ($\alpha\text{-SiO}_2$), кристобалит ($\beta\text{-SiO}_2$), шпинель ($\text{MgO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$) и метасиликат магния ($\text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$). При этом их содержание зависит не только от исходного состава массы, но и от некоторых технологических параметров – дисперсности компонентов шихты, однородности массы, режима обжига и т.д.

Кроме того, в кордиеритовой керамике присутствует в небольшом количестве стекловидная фаза, образующаяся за счет присутствия в сырьевых материалах примесей и специально введенных плавней, а также газовая фаза, объем которой определяется степенью спеченности материала.

Таким образом, эксплуатационные свойства кордиеритовой керамики опре-

* Работа выполнена по государственному заданию Министерства образования и науки РФ высшим учебным заведениям в рамках проекта 145.2014 «Кибернетическое моделирование внутренней микроструктуры вещества».

деляются содержанием указанных фаз и ее структурой. Следует отметить, что в целом свойства керамики тем лучше, чем в ней больше кордиерита [1].

Методика расчета электронных оптических спектров

На основании результатов работ [2, 3] общее математическое описание частотной зависимости $n(\omega)$ оптического показателя преломления композиционного материала, обусловливаемое упругой электронной поляризацией образующих его частиц, может быть достаточно эффективно описано уравнениями:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (1)$$

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L C_i N_i \left(\sum_{j=1}^{K_i} \frac{2e^2}{m_e} \frac{\omega_{0i,j}^2 - \omega^2}{(\omega_{0j,i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_{j,i}^2 \omega^2} \right); \quad (2)$$

$$\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L C_i N_i \left(\sum_{j=1}^{K_i} \frac{2e^2}{m_e} \frac{2\beta_{i,j}\omega}{(\omega_{0j,i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_{j,i}^2 \omega^2} \right), \quad (3)$$

где ε_0 – диэлектрическая постоянная; L – общее число разновидностей кристаллических оксидов, входящих в состав композиционного образца; C_i – их процентное содержание в материале; N_i – объемные концентрации частиц отдельно взятых химических компонент; K_i – общее число разновидностей электронных пар, входящих в состав частиц; e и m_e – заряд и масса электрона.

Для расчетов численных значений динамических параметров $\omega_{0j,i}$ и $b_{j,i}$ вынужденных гармонических колебаний конкретных электронных орбиталей можно достаточно успешно использовать следующие формулы [4]:

$$\omega_{0l,k}^2 = \frac{Q_{l,k} e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e r_{l,k}^3}; \quad r_{l,k} = \frac{\kappa_{l,k}^2 \hbar^2}{Q_{l,k} e^2 m_e}; \quad b_{l,k} = \beta_{l,k} \omega_{0l,k}, \quad (4)$$

$$l = \overline{1, L}, \quad k = \overline{1, K_l},$$

где $Q_{l,k}$ – эффективный заряд атомного остатка, действующий на электронную орбиталь; $r_{l,k}$ – радиус ее сферической электронной орбиты; $\kappa_{l,k}$ – главное квантовое число; \hbar – циклическая постоянная Планка; $\beta_{l,k}$ – параметр пропорциональности, оптимизируемый на основе обработки данных физического эксперимента.

Вычисление объемных концентраций частиц, составляющих кристаллические оксиды (чистые вещества), не представляет особых затруднений, так как может быть выполнено на основании значений их физических плотностей, молекулярной массы и химической формулы [5]. Например, для рассматриваемых кристаллов типа $A_x B_y$ расчетные формулы имеют следующий вид:

$$N_A = \frac{\rho_{AxBy}}{(m_A x + m_B y) a e t} x; \quad (5)$$

$$N_B = \frac{\rho_{AxBy}}{(m_A x + m_B y) a e t} y,$$

где ρ_{AxBy} – физическая плотность кристалла при нормальной температуре; m_A и m_B – атомные массы его ионов; aem – величина атомной массы.

Моделирование электронных спектров чистых композитов

Принимая во внимание доступность справочных данных в основном об измерениях длинноволновых спектров $n(\lambda)$ оптического показателя преломления основных кристаллических оксидов, входящих в состав исследуемой керамики (табл. 1), первоначально проведем ряд вычислительных экспериментов, направленных на моделирование названных спектральных зависимостей для чистых оксидов магния, алюминия и кремния.

Таблица 1

Чистые оксиды	Экспериментальные спектры показателя преломления $n(\lambda)$ [6, 7]				Плотность ρ , кг/м ³ [5]
	0,3 мкм	0,5 мкм	0,7 мкм	1,0 мкм	
MgO	1,794	1,745	0,430	1,723	3580
Al ₂ O ₃	1,815	1,775	0,400	1,755	3960
SiO ₂	1,578	1,549	0,380	1,535	2650

Комплексный анализ спектральных зависимостей, рассчитанных с помощью формул (1) – (5) и представленных на рис. 1, 2 и 3 сплошными линиями, позволяет утверждать, что методика, применяемая для их теоретического расчета, действительно реализует эффективное моделирование рассматриваемых характеристик чистых оксидных кристаллов.

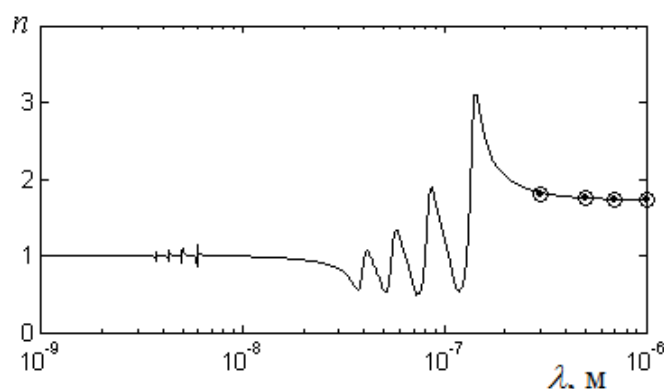


Рис. 1. Электронный оптический спектр кристаллического оксида MgO.

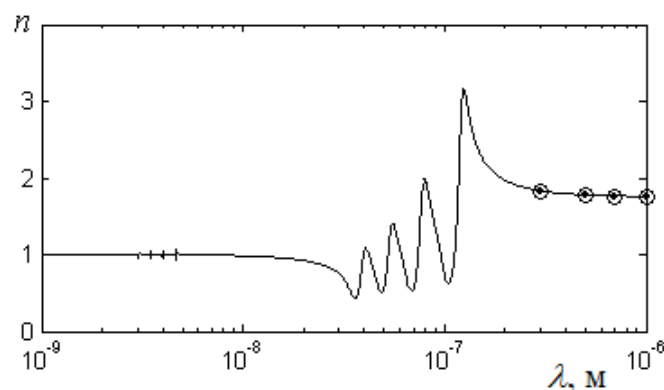


Рис. 2. Электронный оптический спектр кристаллического оксида Al₂O₃.

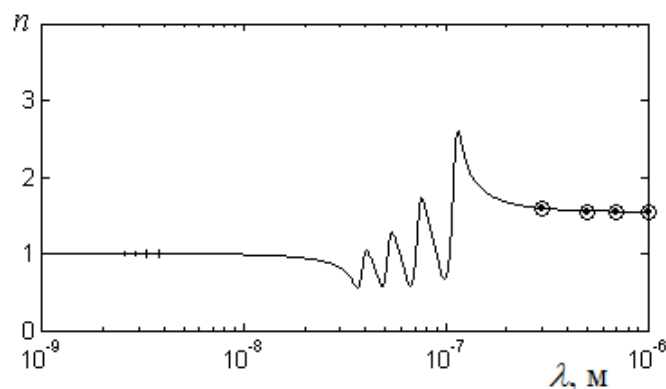


Рис. 3. Электронный оптический спектр кристаллического оксида SiO₂.

Вышеприведенное утверждение основывается на весьма высоком уровне соответствия имитационных характеристик $n(\lambda)$ используемым массивам справочных данных, оцениваемом как с количественной точки зрения (совпадение с контрольными точками по амплитуде), так и качественно (повторение общего динамического характера кривой, аппроксимирующей контрольные точки).

В свою очередь любой керамический образец всегда представляет композиционную систему, образованную совокупностью кристаллической, стекловидной и газовой фаз своих сырьевых компонентов, взятых в определенных массовых соотношениях, – например, промышленный образец кордиеритовой керамики Л-24 имеет компонентный состав [1], представленный в табл. 2.

Таблица 2

Образец	Содержание чистых оксидов, C_i % масс.							ϵ_∞
	Na ₂ O	MgO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	K ₂ O	CaO	Fe ₂ O ₃	
Л-24	1,00	7,20	47,01	41,67	0,50	0,61	2,01	2,871

Однако в настоящее время считается принятым, что упругая электронная поляризация любого вещества является его аддитивным свойством, не зависящим от внутренней структуры или же агрегатного состояния [8 – 10]. Следовательно, кибернетические модели упругой электронной поляризации рассмотренных кристаллических оксидов должны оказаться эффективными и при моделировании оптических свойств исследуемого керамического материала.

Моделирование оптического спектра композиционного образца

Является очевидным, что изучаемые физические свойства исследуемого образца определяются особенностями его строения на микроуровне, которое может быть описано в рамках современного варианта основных трактовок классической теории поляризации. В свою очередь ключевая идея предлагаемого подхода заключается в явном выделении прямых и обратных связей, объективно существующих в динамическом описании общей совокупности процессов поляризации частиц, учитывающем влияние локального поля Лорентца, что дает возможность прямого синтеза имитационной модели оригинального вида (рис. 4).

Отметим, что представленная структурная схема является наглядным эквивалентом математической модели вида (1) и позволяет реализовывать компью-

терное моделирование как временных, так и частотных характеристик самых разнообразных электронных оптических спектров композиционных материалов задаваемого компонентного состава.

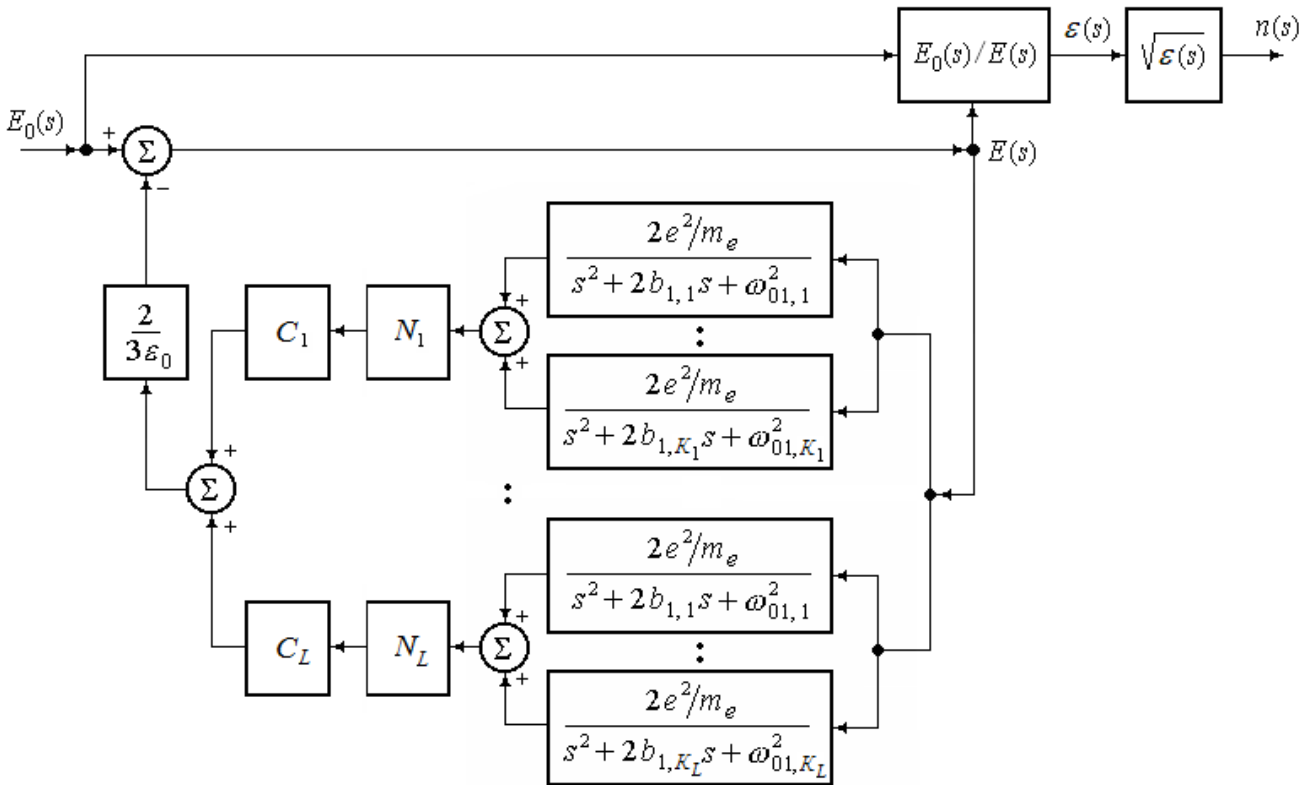


Рис. 4. Структурная схема кибернетической модели общей совокупности поляризационных процессов.

Результаты компьютеризированного теоретического моделирования длинноволнового спектра $n(\lambda)$ оптического показателя преломления кордиеритовой керамики Л-24 представлены на рис. 5.

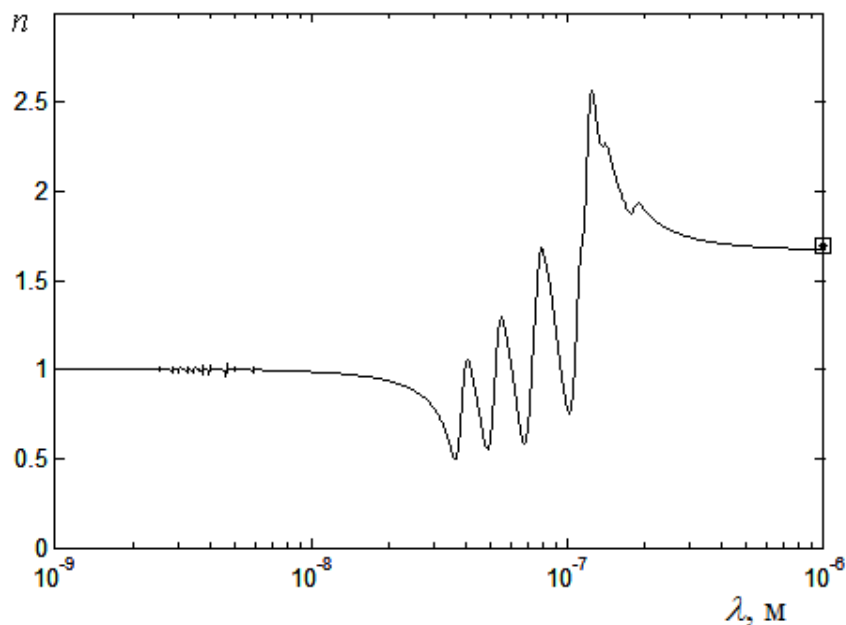


Рис. 5. Длинноволновый спектр оптического показателя преломления керамики Л-24.

Сравнение расчетных значений рассматриваемой спектральной зависимости с контрольными данными величины показателя преломления исследуемой керамики, физически наблюдаемыми в видимом диапазоне частот электромагнитного поля света и отмеченными точкой на представленном графике, показывает их полное количественное совпадение. Следовательно, кибернетическая модель упругой электронной поляризации исследуемого материала может быть эффективно использована и для расчета длинноволнового спектра $\chi(\lambda)$ его оптического показателя преломления, описываемого формулой:

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (6)$$

Результаты компьютеризированного теоретического моделирования рассматриваемой характеристики представлены на рис. 6.

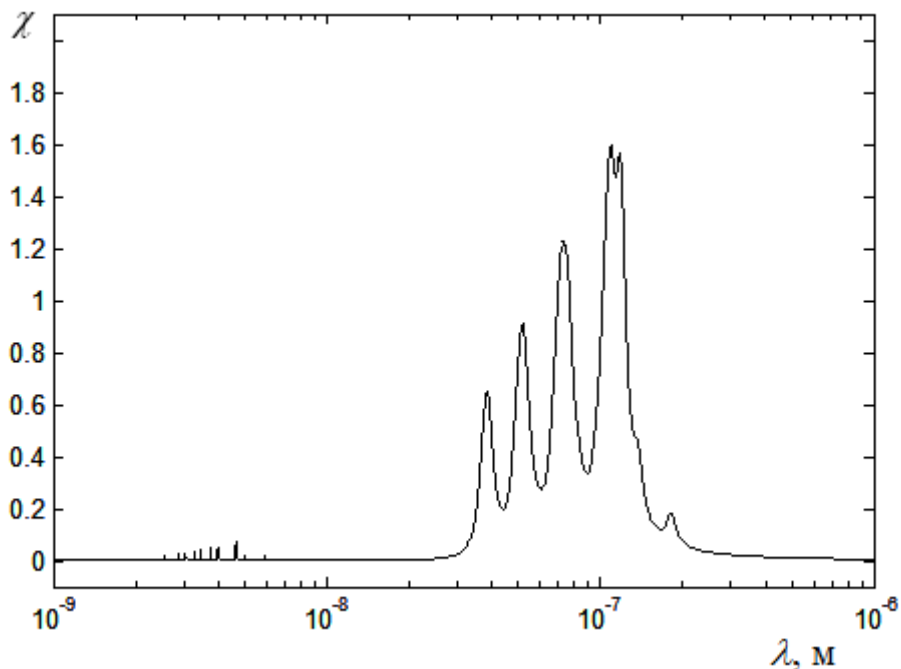


Рис. 6. Длинноволновый спектр оптического показателя поглощения керамики Л-24.

Таким образом, комплексный анализ полученных спектральных зависимостей $n(\lambda)$ и $\chi(\lambda)$ кордиеритовой керамики Л-24, проведенный с учетом всех полученных характеристик, дает возможность констатировать, что основной вклад в ее оптические свойства, наблюдаемые в видимом и ультрафиолетовом диапазоне электромагнитного поля, вносит электронная поляризация ионов кислорода.

Заключение

При выполнении всех проведенных вычислительных экспериментов непосредственно применялась новая методика определения динамических параметров исследуемых физических процессов, основанная на оптимизации экранирующих вкладов оптических электронов кислорода, реализуемой за счет последовательного перебора их возможных величин, подробно описанная в работе [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Виноградов Б. А., Костюков Н. С., Харичева Д. Л.* Диэлектрики и радиация: В 8 кн. – Кн. 6: Герметичные металлокерамические соединения. – М.: Наука, 2004.
2. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Моделирование упругой электронной поляризации композиционных электрокерамик. II // Информатика и системы управления. – 2008. – № 3(17). – С. 27-33.
3. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Моделирование упругой электронной поляризации композиционных электрокерамик. III // Информатика и системы управления. – 2008. – № 4(18). – С. 11-20.
4. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Методика расчета экранирующих вкладов оптических электронов аниона кислорода // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2009. – № 4(15). – С. 17-24.
5. *Ефимов А.И.* и др. Свойства неорганических соединений: Справочник. – Л.: Химия, 1983.
6. *Золотарев В.М.* и др. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. – Л.: Химия, 1984.
7. SOPRA N&K Database. – <http://www.sopra-sa.com>.
8. *Хиппель А.* Диэлектрики и волны. – М.: ИИЛ, 1960.
9. *Деккер А.* Физика электротехнических материалов. – М.-Л.: Госэнергоиздат, 1962.
10. *Фейман Р., Лейтон Р., Сендс М.* Феймановские лекции по физике. – М.: Мир, 1967.

E-mail:

Еремин Илья Евгеньевич – marinecops@mail.ru;

Жилиндина Ольга Викторовна – olgashest@mail.ru.



INTERNATIONAL FEDERATION
OF AUTOMATIC CONTROL

10th IFAC Symposium on Nonlinear Control Systems

Marriott Hotel Monterey, California, USA

August 23-25, 2016

https://www.math.ucdavis.edu/static/conferences/nolcos_2016/

Important dates:

Opening paper submission	September 15, 2015
Deadline for paper submission	January 18, 2016
Deadline for invited session proposal submission	January 11, 2016
Authors Notified of Acceptance/rejection	April 15, 2016
Deadline for final manuscript submission	May 25, 2016
Deadline for early registration	June 10, 2016