

руктурных материалов по полимерной технологии, обладающих комплексом улучшенных свойств (см. табл.).

### Выводы

Проведено исследование спектров внутреннего трения композитов на основе фенолоформальдегидных смол, выявлены зоны локальной неупругости этих композитов и влияние на эти зоны (на локальные коэффициенты поглощения) наноразмерных частиц комплекса ванадия (V-ФФО).

Полученные спектры характеризуются двумя наиболее интенсивными пиками потерь:

низкотемпературный пик (менее интенсивный) при  $T = -50$  °С;

наиболее интенсивный пик, расположенный в области температур 150–200 °С.

Дана классификация диссипативных процессов в спектрах внутреннего трения реактопластов на примере композиционного материала на основе ФФС. По интенсивности и температурному положению  $\alpha$ -пика потерь в процессе термической обработки композиционного материала, не содержащего комплекс V-ФФО, выявлена кинетика структурообразования сетки композита за счет перехода "свободных" сегментов макромолекул ФФС в "связанное" состояние.

Изменение содержания комплекса V-ФФО выявляет некую аномальную закономерность в области концентрации  $C_{V-ФФО} \approx 10$  % (об.).

Это проявляется на спектре  $\lambda = f(T)$  в виде возникновения еще одного более высокотемпературного пика потерь в области температур 320–350 °С и существенному расширению и отчетливому дроблению основного интенсивного максимума потерь.

Установлено, что в фенопластах, находящихся в твердом агрегатном состоянии до температуры химического разложения (320–350 °С), присутствуют локальные области неупругости ( $\pi$ - и  $\alpha$ -процессы релаксации).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Симонов-Емельянов И. Д., Шембель Н. Л., Кукулина Л. А. Физико-химические закономерности получения карбонизованных пористых изделий из полимерных композиционных материалов // Конструкции из композиционных материалов. 1999. № 1. С. 27–37.
2. Симонов-Емельянов И. Д., Шембель Н. Л., Афонин М. М., Зайцев В. И. Высокопористые тугоплавкие материалы на основе карбидов переходных металлов // Конструкции из композиционных материалов. 2001. № 1. С. 31–37.
3. Букин В. И., Смирнова А. Г., Резник А. М. Экстракция ванадия (V) азотсодержащими олигомерами // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2000. № 3. С. 16–22.
4. Фастов Н. С. К теории упругости последствий // 5-й сб. тр. Проблемы материаловедения и физики металлов. М.: ГНТИ. 1958. С. 550–576.
5. Мешков С. И., Шермергор Т. Д. О температурной зависимости внутреннего трения крутильного маятника // Прикладная механика и техническая физика. 1962. № 6. С. 98–104.
6. Постников В. С. Внутреннее трение в металлах. М.: Металлургия. 1969. 330 с.
7. Баргенов Г. М., Баргенова А. Г. Релаксационные свойства полимеров. М.: Химия. 1992. 384 с.
8. Ставров В. П., Дедиухин В. Г., Соколов А. Д. Технологические испытания реактопластов. М.: Химия. 1981. С. 144–151.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ И ПРОЦЕССОВ

УДК 621.763:004

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МЕХАНИЧЕСКОГО СПЛАВЛЕНИЯ В ШАРОВЫХ МЕЛЬНИЦАХ

Часть I. Кинетико-статистическая геометрия изменений в обрабатываемом материале в процессе механического сплавления (окончание I ч.)\*

Е. В. ШЕЛЕХОВ, Т. А. СВИРИДОВА

МИСиС

*Разработана кинетико-статистическая модель изменений в обрабатываемом материале при механическом сплавлении. Введены понятия механических частот нулевого, первого и второго порядков, которые характеризуют интенсивность пластической деформации сред-*

\* Начало статьи опубликовано в журнале "Материаловедение" № 9, 2007 г.

нестатистического микрообъема порошка. Для ряда практически важных случаев показана связь механических частот с кинетикой деформационного упрочнения порошка и фазовых превращений, протекающих в механореакторе.

### Пластическая деформация общего вида

При касательном ударе пластическая деформация может быть близка к чисто сдвиговой. При смешанном нормально-тангенциальном ударе, как и при чисто нормальном, сдвиг одновременно идет по множеству систем скольжения, т. е. мелкие (практически бесконечно мелкие) порции сдвига по разным системам чередуются, хотя интегрально сдвиг по каждой отдельной системе может быть большим. В таких условиях понятие параметра  $\lambda^2$  необходимо видоизменить и обобщить. Именно эта величина входит в механическую частоту  $\nu_2$ , которая определяет скорость утонения пластин "рулета", а значит и время перемешивания зависит, прежде всего, от нее.

Пусть за время удара кубический микрообъем обрабатываемого материала (сторона кубика, например, равна 1 мкм), находящийся на конце радиуса-вектора  $\mathbf{r}_0$ , пластическим течением смещается на  $\xi(\mathbf{r}_0)$  и оказывается на конце радиуса-вектора  $\mathbf{r}'_0 = \mathbf{r}_0 + \xi(\mathbf{r}_0)$  (рис. 3). При этом микрообъем разворачивается и деформируется, т. е. превращается из куба в косой параллелепипед того же объема, поскольку материал несжимаем. В пределах микрообъема ввиду его малости деформация постоянна и однородна, а смещения линейны. Под деформацией подразумеваются девять частных производных

$\xi_{i,j} \equiv \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}$  (где  $i, j = 1, 2, 3$ ) либо симметричный

тензор деформаций

$$\varepsilon_{i,j} = \frac{1}{2} (\xi_{i,j} + \xi_{j,i}). \quad (28)$$

Следует, однако, иметь в виду, что в отличие от теории упругости, при пластическом течении величины  $\xi_{i,j}$  могут быть большими, например, порядка 1. Поэтому корректнее было бы называть их градиентом смещений при пластическом течении.

Пусть до удара некоторая точка внутри кубического микрообъема была смещена относительно вершины кубика  $\mathbf{r}_0$  на вектор  $\Delta \mathbf{r} \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = x_i \mathbf{e}_i$  (по повторяющемуся индексу суммирование), где  $\mathbf{e}_i$  — единичные орты декар-

това базиса, направленные вдоль ребер кубика;  $x_i$  — координаты точки относительно вершины кубика.

После удара смещение этой точки относительно вершины косого параллелепипеда  $\mathbf{r}'_0$  равно  $\Delta \mathbf{r}' = \mathbf{r}' - \mathbf{r}'_0 = x'_i \mathbf{e}_i = x_i \mathbf{a}_i$ . Последняя запись означает, что можно использовать два эквивалентных описания деформации микрообъема: 1) изменение координат  $x_i \rightarrow x'_i$  в неизменном декартовом базисе  $\{\mathbf{e}_i\}$ ; 2) изменение ортов базиса  $\mathbf{e}_i \rightarrow \mathbf{a}_i$  ( $\mathbf{a}_i$  направлены вдоль ребер косого параллелепипеда или просто равны этим ребрам, если сторона исходного кубика была единичной) при сохранении координат  $x_i$ .

Из-за малости микрообъема преобразование координат можно считать линейным с матрицей  $S$ , т. е.  $x'_i = S_{ij} x_j$  или  $(x') = S(x)$ , где  $(x')$ ,  $(x)$  — столбцы координат. Поскольку объем при преобразовании сохраняется, то  $\det S = 1$ .

Пусть  $\{\mathbf{e}_i\}$ ,  $\{\mathbf{a}_i\}$  — столбцы базисных ортов;  $T$  — знак транспонирования, т. е.  $(x)^T$  — строка координат. Тогда  $\Delta \mathbf{r} = (x)^T \{\mathbf{e}_i\}$ ;  $\Delta \mathbf{r}' = (x')^T \{\mathbf{e}_i\} = (x)^T S^T \{\mathbf{e}_i\} = (x)^T \{\mathbf{a}_i\}$ . Поскольку координаты  $(x)$  произвольны, из последнего равенства вытекает  $\{\mathbf{a}_i\} = S^T \{\mathbf{e}_i\}$ , т. е.  $\mathbf{a}_i = S_{ji} \cdot \mathbf{e}_j$ . Таким образом, если при первом способе описания деформации матрица преобразования координат равна  $S$ , то это эквивалентно тому, чтобы при неизменных координатах точек внутри кубика преобразовывать вектора базиса матрицей  $S^T$ .

Очевидно,  $\mathbf{e}_j = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_j}$ . Поскольку  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \xi(\mathbf{r})$ , то

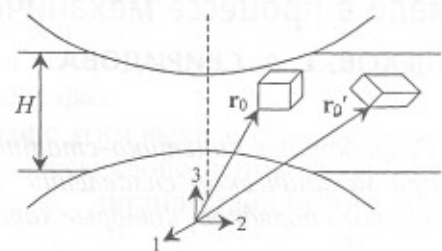


Рис. 3. Схема смещения и деформации микрообъема порошка при пластическом течении

$$\mathbf{a}_j = \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial x_j} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi}{\partial x_j}, \text{ откуда } \frac{\partial \xi}{\partial x_j} = \mathbf{a}_j - \mathbf{e}_j = S_{ij} \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j. \text{ Обозначив } M_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}, \text{ имеем}$$

$$\xi_{i,j} = M_{ij} = S_{ij} - \delta_{ij}, \text{ т. е. } M = S - E, \quad (29)$$

где  $E$  — единичная матрица.

При слабой пластической деформации  $|\xi_{i,j}| = |M_{ij}| \ll 1$ . Однако при сильной деформации матрица  $S$  может существенно отличаться от единичной. Малая деформация нас будет интересовать как особый случай, поскольку требуется найти обобщение параметра  $\lambda^2$  для чистого сдвига, а формула (15) и все дальнейшие следствия из нее получены в предположении  $\lambda \ll 1$ .

Рассмотрим в качестве примера деформацию расплющивания материала, т. е. уменьшения его толщины по оси "3" в  $1 - \varepsilon$  раз с компенсирующим и равным растяжением в  $\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}}$  раз по осям "1" и "2". Здесь  $\varepsilon$  — параметр деформации, который может меняться от 0 до 1, т. е. деформация может быть как малой, так и очень большой, поскольку число  $\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}}$  может быть много больше 1 при  $\varepsilon \rightarrow 1$ . Поскольку при  $\varepsilon \ll 1$

$$\frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}} = 1 + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{3}{8}\varepsilon^2 + \dots, \text{ то}$$

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon}} & 0 \\ 0 & 0 & 1-\varepsilon \end{pmatrix} = E + \varepsilon \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} 3/8 & 0 & 0 \\ 0 & 3/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \dots \quad (30)$$

В случае произвольной матрицы  $S$  при малых деформациях, используя (29), можно произвести разложение  $S$  по степеням некоего малого параметра деформации  $\varepsilon \sim |\xi_{i,j}|$ :

$$S = E + M + E + \varepsilon \tilde{M}^{(1)} + \varepsilon^2 \tilde{M}^{(2)} + \dots = E + M^{(1)} + M^{(2)} + \dots, \quad (31)$$

где  $M^{(k)} = \varepsilon^k \tilde{M}^{(k)}$ ,  $k$  — порядок малости;  $|\tilde{M}_{ij}^{(k)}| \sim 1$ ;  $|M_{ij}^{(k)}| \sim \varepsilon^k$ . Поскольку

$$S = \begin{pmatrix} 1 + M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & 1 + M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & 1 + M_{33} \end{pmatrix}, \quad (32)$$

то  $\det S = 1 + \varepsilon P + \varepsilon^2 Q + \dots$ , где  $P = \sum_i \tilde{M}_{ii}^{(1)}$ ;

$$Q = \sum_i \tilde{M}_{ii}^{(2)} + \tilde{M}_{11}^{(1)} \tilde{M}_{22}^{(1)} + \tilde{M}_{22}^{(1)} \tilde{M}_{33}^{(1)} + \tilde{M}_{11}^{(1)} \tilde{M}_{33}^{(1)} - \tilde{M}_{12}^{(1)} \tilde{M}_{21}^{(1)} - \tilde{M}_{23}^{(1)} \tilde{M}_{32}^{(1)} - \tilde{M}_{13}^{(1)} \tilde{M}_{31}^{(1)}. \quad (33)$$

Так как  $\det S = 1$  при любом  $\varepsilon$ , то  $P = 0$  и  $Q = 0$ , а значит также  $\varepsilon P = 0$  и  $\varepsilon^2 Q = 0$ . Поэтому можно убрать тильды, перейдя от  $\tilde{M}_{ij}^{(k)}$  к  $M_{ij}^{(k)}$ .

Условие  $P = 0$  означает:

$$M_{11}^{(1)} + M_{22}^{(1)} + M_{33}^{(1)} = 0. \quad (34)$$

Если возвести обе части равенства (34) в квадрат, то условие  $Q = 0$  приводит к соотношению:

$$\sum_i M_{ii}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} M_{ij}^{(1)} M_{ji}^{(1)}, \quad (35)$$

или с точностью до членов  $\sim \varepsilon^2$

$$\sum_{i,j} \left( \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right) \left( \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) = 2 \operatorname{div} \xi, \quad (36)$$

поскольку

$$\operatorname{div} \xi = \xi_{i,i} = \sum_i (M_{ii}^{(1)} + M_{ii}^{(2)}) = \sum_i M_{ii}^{(2)}. \quad (37)$$

Таким образом, след матрицы  $M$  или дивергенция  $\xi$  в первом порядке малости по  $\varepsilon$  равна 0. Порядок малости величины  $\operatorname{div} \xi$  — второй (во втором порядке она отлична от 0).

Если ввести величину

$$\Lambda^2 = \sum_{i,j} \left( \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right)^2, \quad (38)$$

то, используя определение тензора деформаций (28) и соотношение (36), легко получить

$$\sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2 = \frac{1}{2} \Lambda^2 + \text{div} \xi. \quad (39)$$

Определим, как меняется при ударе усредненный по направлениям квадрат расстояния между двумя атомами в пределах микрообъема.

Пусть два атома до удара разделены вектором  $\mathbf{r} = x_i \mathbf{e}_i$ , который после удара переходит в  $\mathbf{r}' = x_i \mathbf{a}_i$ , а  $G_{ij} = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$  — компоненты метрического тензора деформированного микрообъема, или в матричном виде  $G = \{\mathbf{a}\} \cdot \{\mathbf{a}\}^T$ . Метрический тензор исходного кубического микрообъема  $\{\mathbf{e}\} \cdot \{\mathbf{e}\}^T = E$ , так как  $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$ . Отсюда  $(\mathbf{r}')^2 = G_{ij} x_i x_j$ . Если произвести усреднение вектора  $\mathbf{r}$  по сфере радиуса  $r = |\mathbf{r}| = \text{const}$ , т. е. по всем направлениям при постоянной длине вектора, получим  $\langle x_i x_j \rangle =$

$$= \frac{r^2}{3} \delta_{ij}. \text{ Отсюда } \langle (r')^2 \rangle = \frac{G_{ii}}{3} r^2, \text{ где } G_{ii} \text{ — след тензора } \mathbf{G}. \text{ Поскольку } \{\mathbf{a}\} = S^T \{\mathbf{e}\}, \text{ то } G = \{\mathbf{a}\} \cdot \{\mathbf{a}\}^T = S^T \{\mathbf{e}\} \cdot \{\mathbf{e}\}^T S = S^T S. \text{ Итак,}$$

$$G = S^T S. \quad (40)$$

Поскольку  $S = E + M$ , где  $M_{ij} = \xi_{i,j}$ , то

$$G_{ii} = S_{ji} S_{ji} = (\delta_{ji} + M_{ji})(\delta_{ji} + M_{ji}) = 3 + 2M_{ii} + M_{ji} M_{ji} = 3 + 2 \text{div} \xi + \Lambda^2. \quad (41)$$

Если по аналогии с (3) написать  $\langle r'^2 \rangle = r^2 \left(1 + \frac{\lambda^2}{3}\right)$ , то

$$\lambda^2 = \Lambda^2 + 2 \text{div} \xi. \quad (42)$$

Заметим, что это соотношение верно и при больших деформациях  $\xi_{i,j}$ .

При малых же деформациях  $|\xi_{i,j}| \ll 1$  справедливо выражение (39), с помощью которого (42) легко преобразуется к виду

$$\lambda^2 = 2 \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij}^2, \quad (43)$$

т. е. вместо квадрата тангенса угла сдвига следует брать удвоенную сумму квадратов компонент тензора деформаций.

Нас, однако, интересует не столько скорость разбегания пары атомов при ударах, сколько скорость утонения пластины "рулета". Необходимо проверить, работает ли формула (43) и там. Пусть  $\mathbf{n}, \mathbf{m}, \mathbf{k}$  — тройка единичных взаим-

но ортогональных векторов, причем  $\mathbf{n}$  направлен по нормали к пластине, а  $\mathbf{m}$  и  $\mathbf{k}$  лежат в плоскости поверхности пластины. После удара эти вектора переходят в  $\mathbf{n}'$ ,  $\mathbf{m}'$  и  $\mathbf{k}'$  такие, что если  $\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i$ , то  $\mathbf{n}' = n_i \mathbf{a}_i$  и т. п. Поскольку объем любого параллелепипеда сохраняется, то  $\mathbf{n}' \cdot (\mathbf{m}' \times \mathbf{k}') = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{k}) = 1$ . Если толщина пластины до удара была  $h$ , то толщина после удара  $h' = h \mathbf{m}' \cdot \frac{(\mathbf{m}' \times \mathbf{k}')}{|\mathbf{m}' \times \mathbf{k}'|} = \frac{h}{|\mathbf{m}' \times \mathbf{k}'|}$ . Вектор  $\mathbf{m}' \times \mathbf{k}' = m \mathbf{a}_i \times k_j \mathbf{a}_j = p_i \mathbf{a}_i^*$ . Если  $\mathbf{a}_i$  — вектора ковариантного базиса, то  $\mathbf{a}_i^*$  — вектора контравариантного базиса (их пример — вектора обратной решетки в кристаллографии) такие, что

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* = \delta_{ij}. \quad (44)$$

Соотношение (44) является определением  $\mathbf{a}_j^*$ . В нашем случае из-за сохранения объема любого параллелепипеда при деформации  $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3) = 1$ , поэтому соотношению (44) удовлетворяют вектора  $\mathbf{a}_1^* = \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$ ,  $\mathbf{a}_2^* = \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_3^* = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$ . Эти выражения и объясняют, почему вектор  $\mathbf{m}' \times \mathbf{k}'$  раскладывается по базисным векторам  $\mathbf{a}_i^*$  с координатами  $p_i = e_{ijl} m_j k_l$ , где  $e_{ijl}$  — полностью антисимметричный единичный тензор, т. е.  $p_1 = m_2 k_3 - m_3 k_2$ ,  $p_2 = m_3 k_1 - m_1 k_3$ ,  $p_3 = m_1 k_2 - m_2 k_1$ . В представлении деформируемых базисных векторов  $\mathbf{a}_i$  (или  $\mathbf{a}_i^*$ ) координаты остаются неизменными, поэтому  $p_i$  таковы же, какими они были до удара, когда  $\mathbf{a}_i^*$  были равны  $\mathbf{e}_i$ , т. е.  $p_i$  — координаты единичного вектора, перпендикулярного пластине. Поскольку  $\{\mathbf{a}\} = S^T \{\mathbf{e}\}$ , то для выполнения соотношения (44) вектора  $\mathbf{a}_i^*$  должны преобразовываться по закону  $\{\mathbf{a}^*\} = S^{-1} \{\mathbf{e}\}$  (это ковариантный и контравариантный законы преобразования). Действительно, в этом случае  $\{\mathbf{a}\} \cdot \{\mathbf{a}^*\}^T = S^T \{\mathbf{e}\} \cdot \{\mathbf{e}\}^T S^{-1T} = S^T (S^T)^{-1} = E$ , что и означает  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* = \delta_{ij}$ .

Метрический тензор контравариантного базиса  $G_{ij}^* = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$ , или в матричном виде  $\mathbf{G}^* = \{\mathbf{a}^*\} \cdot \{\mathbf{a}^*\}^T = \mathbf{s}^{-1} \cdot \{\mathbf{e}\} \cdot \{\mathbf{e}\}^T \cdot \mathbf{s}^{-1T} = \mathbf{s}^{-1} \cdot \mathbf{s}^{-1T}$ . Как видно из сравнения с (40)

$$\mathbf{G}^* = S^{-1} S^{-1T} = \mathbf{G}^{-1}, \quad (45)$$

т. е.  $\mathbf{G}^*$  обратен по отношению к метрическому тензору ковариантного базиса  $\mathbf{G}$ .

Теперь можно написать коэффициент изменения толщины пластины при ударе в виде

$$K = \frac{h'}{h} = \frac{1}{\sqrt{G_{ij}^{-1} p_i p_j}}, \quad (46)$$

где  $p_i$  — координаты единичной нормали к пластине, так как  $(\mathbf{m}' \times \mathbf{k}')^2 = p_i \mathbf{a}_i^* p_j \mathbf{a}_j^* = G_{ij}^{-1} p_i p_j$ .

Заметим, что выражение (46) верно и при больших деформациях.

В случае деформации расплющивания (30)

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} 1-\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} \end{pmatrix} \text{ и, поскольку } p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = 1, \text{ то коэффициент изменения толщины пластины при ударе } K = \frac{1}{\sqrt{(1-\varepsilon)(1-p_3^2) + p_3^2/(1-\varepsilon)^2}}. \text{ Обозначив } p_3 = \cos \psi \text{ и производя усреднение } K \text{ по всевозможным и равновероятным положениям пластины, получим}$$

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \int_0^{\pi/2} \frac{\sin \psi d\psi}{\sqrt{(1-\varepsilon)\sin^2 \psi + \frac{\cos^2 \psi}{(1-\varepsilon)^2}}} = \\ &= \frac{\alpha}{B} \ln \frac{1+B}{A}, \end{aligned} \quad (47)$$

где  $\alpha = 1 - \varepsilon$ ;  $A = \alpha^{3/2}$ ;  $B = \sqrt{1 - A^2}$ . Расчет по формуле (47) дает значения, представленные в табл. 2.

При  $\varepsilon \ll 1$

$$\langle K \rangle = 1 - \frac{\varepsilon^2}{5}. \quad (48)$$

Преобразуем выражение (46) для случая малых деформаций с произвольной матрицей  $S$ . Если

$$S = E + M, \quad (49)$$

причем

$$M_{ij} = \xi_{i,j} \ll 1, \quad (50)$$

то с точностью до членов второго порядка малости по  $\xi_{i,j}$

$$S^{-1} \approx E - M + M^2. \quad (51)$$

С этой же точностью

$$\mathbf{G}^{-1} = S^{-1} S^{-1T} \approx E - M - M^T + M^2 + (M^T)^2 + M M^T. \quad (52)$$

Свертка

$$G_{ij}^{-1} p_i p_j = 1 + A + B, \quad (53)$$

где

$$A = -2M_{ij} p_i p_j, \quad (54 \text{ a})$$

$$B = (2M_{ik} M_{kj} + M_{ik} M_{jk}) p_i p_j. \quad (54 \text{ b})$$

При  $x \ll 1$

$$(1+x)^{-1/2} \approx 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 + \dots \quad (55)$$

Поскольку  $A$  — величина первого порядка малости, а  $B$  — второго, то с точностью до второго порядка

$$K = (G_{ij}^{-1} p_i p_j)^{-1/2} \approx 1 - \frac{A}{2} + \frac{3}{8}A^2 - \frac{B}{2}. \quad (56)$$

Произведем усреднение  $K$  по ориентации пластины, т. е. по направлению единичного вектора  $\mathbf{p}$  с учетом того, что

$$\langle p_i p_j \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ij}, \quad (57)$$

$$\langle p_i p_j p_k p_l \rangle = \frac{1}{15} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (58)$$

а также соотношения (36) и определения (38) в виде:

$$M_{ij} M_{ji} = 2 \operatorname{div} \xi; \quad (59)$$

$$M_{ij} M_{ij} = \Lambda^2. \quad (60)$$

Имеем:

$$\langle A \rangle = -\frac{2}{3} M_{ii} = -\frac{2}{3} \operatorname{div} \xi; \quad (61)$$

$$\langle A^2 \rangle = \frac{4}{15} [2 \operatorname{div} \xi + \Lambda^2]; \quad (62)$$

## 2. Результаты расчета по формуле (47)

$\varepsilon$	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$\langle K \rangle$	1	0,998	0,990	0,975	0,949	0,909	0,848	0,758	0,624	0,415

$$\langle B \rangle = \frac{1}{3} [4 \operatorname{div} \xi + \Lambda^2]. \quad (63)$$

При усреднении  $\langle A^2 \rangle$  была опущена величина  $M_{ij}M_{kk} = (\operatorname{div} \xi)^2$ , так как она четвертого порядка малости. Отсюда получаем окончательно с учетом (39)

$$\langle K \rangle \approx 1 - \frac{\lambda^2}{15}, \quad (64)$$

где  $\lambda^2$  выражается согласно (43).

Поскольку (64) идентично (15), это означает, что выражение (43) является адекватным обобщением величины  $\lambda^2$  при чистом сдвиге на случай произвольных малых деформаций как в смысле скорости разбегания атомов, так и в смысле скорости утонения пластины. Для деформации расплющивания (30)  $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon/2$ ;  $\varepsilon_{33} = -\varepsilon$  (остальные  $\varepsilon_{ij} = 0$ ), откуда

$$\lambda^2 = 2 \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2 = 3\varepsilon^2 \quad (65)$$

и (64) снова приводит к (48).

Рассмотрим с новых позиций чистый сдвиг с  $\lambda = \operatorname{tg} \alpha$ . В этом случае  $\xi_{i,j} = M_{ij} = \lambda m_i n_j$ , где  $m_i$  и  $n_j$  — проекции ортогональных единичных векторов системы скольжения  $\mathbf{m}$  и  $\mathbf{n}$ . В матричном виде  $M = \lambda \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}^T$ , где  $\mathbf{m}$  — столбец, а  $\mathbf{n}^T$  — строка координат векторов  $\mathbf{m}$  и  $\mathbf{n}$ . Имеем:

$$\operatorname{div} \xi = M_{ii} = \lambda m_i n_i = \lambda \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (66)$$

причем равенство нулю точное при любых  $\lambda$ . Матрица

$$M^2 = \lambda^2 \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}^T \cdot \mathbf{m} \cdot \mathbf{n}^T = 0, \quad (67)$$

так как  $\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{m} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = 0$  (опять же  $M^2 = 0$  точно). Поскольку  $S = E + M$  и  $M^2 = 0$ , то  $S^{-1} = E - M$  (опять же точно). Соотношение (36)  $M_{ij}M_{ji} = (M^2)_{ii} = 0$  выполняется точно, так как след нулевой матрицы  $M^2$  тоже равен нулю. Имеем также:

$$\begin{aligned} \Lambda^2 &= M_{ij}M_{ij} = \lambda^2 m_i n_j m_i n_j = \\ &= \lambda^2 (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) = \lambda^2, \end{aligned} \quad (68)$$

откуда

$$\begin{aligned} 2 \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2 &= \frac{1}{2} (M_{ij} + M_{ji})(M_{ij} + M_{ji}) = \\ &= \Lambda^2 + (M^2)_{ii} = \lambda^2, \end{aligned} \quad (69)$$

что также выполняется точно при сколь угодно больших  $\lambda$ .

В случае одновременного действия на контактную зону тангенциальной сдвиговой деформации величиной  $\lambda$  и нормальной деформации расплющивания величиной  $\varepsilon$ , эти две деформации идут мелкими порциями и чередуясь. Матрица линейного преобразования при любых  $\varepsilon$  и  $\lambda$  имеет вид:

$$\begin{aligned} S &= E + M = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( k_1^{1/N} \ 0 \ \frac{\lambda}{N} \right)^N = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & k_1/\lambda \\ 0 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & k_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (70)$$

где  $k_1 = 1/\sqrt{1-\varepsilon}$ ;  $k_2 = 1-\varepsilon$ . Матрица тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$  равна  $\frac{1}{2}(M + M^T)$  и при  $\varepsilon \ll 1$  и про-

извольном  $\lambda$  принимает вид  $\begin{pmatrix} \varepsilon/2 & 0 & \lambda/2 \\ 0 & \varepsilon/2 & 0 \\ \lambda/2 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}$ . От-

сюда

$$2 \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2 = 3\varepsilon^2 = \lambda^2, \quad (71)$$

что доказывает допустимость разбиения  $v_2$  на две компоненты (нормальную и касательную) с последующим их суммированием.

Выше все внимание было сосредоточено на расчете механической частоты  $v_2$ . Необходимо подробнее остановиться на расчете  $v_1$  в случае деформации расплющивания, которая соответствует нормальным ударам. Пусть расплющивание происходит, как и раньше, по оси  $z$ . Возьмем системы скольжения с векторами  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{m}_1$ , лежащими в плоскости  $(xz)$  под углом  $\pm 45^\circ$  к координатным осям  $x$  и  $z$  (рис. 4). В этой системе скольжения касательные напряжения при

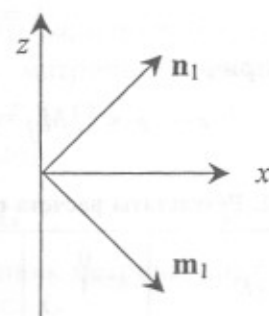


Рис. 4. Схема одной из систем скольжения с максимальным касательным напряжением

расплющивании будут максимальными, как и в любой другой, полученной из этой поворотом вокруг оси  $z$  на произвольный азимутальный угол  $\varphi$ . Возьмем серию углов  $\varphi_k = \frac{2\pi}{n}(k-1)$ , где  $1 \leq k \leq n$ ,  $n \geq 3$  — произвольное целое число. В этих  $n$  системах скольжения вектора  $\mathbf{n}_k$  и  $\mathbf{m}_k$  будут иметь координаты:

$$\mathbf{m}_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_k, s_k, -1); \mathbf{n}_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_k, s_k, 1), \quad (72)$$

где  $c_k = \cos\varphi_k$ ;  $s_k = \sin\varphi_k$ . Пусть суммарный сдвиг  $\lambda$  (сумма сдвигов во всех системах скольжения) разбивается на  $nN$  порций, т. е.  $N$  — число полных оборотов по углу  $\varphi$ , или число чередующихся проходов всех  $n$  систем скольжения.

Матрица линейного преобразования координат

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \prod_{k=1}^n \left( E + \frac{\lambda}{nN} m^{(k)} n^{(k)T} \right) \right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ E + \frac{\lambda}{nN} \sum_{k=1}^n m^{(k)} n^{(k)T} \right]^N, \quad (73)$$

где  $m^{(k)}$  — столбец координат вектора  $\mathbf{m}_k$ ;  $n^{(k)T}$  — строка (транспонированный столбец) координат вектора  $\mathbf{n}_k$ .

Поскольку  $\sum_{k=1}^n c_k = \sum_{k=1}^n s_k = \sum_{k=1}^n c_k s_k = 0$ ;  $\sum_{k=1}^n c_k^2 = \sum_{k=1}^n s_k^2 = \frac{n}{2}$ , то

$$\sum_{k=1}^n m^{(k)} n^{(k)T} = n \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \text{ откуда}$$

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\lambda}{4N} & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\lambda}{4N} & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{\lambda}{2N} \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} e^{\lambda/4} & 0 & 0 \\ 0 & e^{\lambda/4} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda/2} \end{pmatrix}. \quad (74)$$

Таким образом, матрица  $S$  соответствует деформации расплющивания, причем она не зависит от  $n$  и  $1 - \varepsilon = e^{-\lambda/2}$ , что верно и при больших значениях  $\varepsilon$  и  $\lambda$ . При большом  $n$  имеем равномерное распределение систем скольжения (с полярным углом  $\psi = 45^\circ$ , в которых скольжение начнется раньше всего) по азимутальному углу  $\varphi$ . При  $\lambda \ll 1$   $e^{\lambda/4} \approx 1 + \frac{\lambda}{4}$ ;  $e^{-\lambda/2} \approx 1 - \frac{\lambda}{2}$ , т. е.  $\varepsilon = \frac{\lambda}{2}$ .

Таким образом, при малых деформациях расплющивания в  $v_2 = \langle \lambda^2 \rangle v_0$  следует заменять  $\lambda^2$  на  $3\varepsilon^2$ , а в  $v_1 = \langle \lambda \rangle v_0$  вместо  $\lambda$  следует подставлять  $2\varepsilon$ . Хотя на самом деле при определении  $v_1$  необходимо учитывать истинные кристаллографические системы скольжения, подстановка

$$\lambda = 2\varepsilon, \quad (75)$$

по-видимому, является хорошим приближением.

### Примеры процессов, управляемых различными механическими частотами

1. Утонение пластинчатого "рулета". Утонение — пример процесса, управляемого частотой  $v_2$ . В случае смеси двух (или более) пластичных компонентов первоначально равноосные включения этих компонентов при помолу расплющиваются и приобретают форму чередующихся пластин. Как было показано выше, толщина пластины  $h$  со временем помола  $t$  убывает по закону  $h(t) = h(0)e^{-t/\tau}$ , где  $\tau = 15/v_2$ . Соответственно, площадь пластины  $S$  растет по закону  $S(t) = S(0)e^{t/\tau}$ . Таким образом, межфазная поверхность быстро увеличивается.

Рассмотрим диффузионно контролируемое превращение. Пусть для простоты компоненты  $A$  и  $B$  первоначально занимали приблизительно одинаковый объем и площадь поверхности включений компонента  $A$  растет по закону  $S(t) = S_0 e^{t/\tau}$ . При этом скорость создания новой поверхности  $\frac{dS}{dt} = \frac{S_0}{\tau} e^{t/\tau}$ . Отсюда объемная доля конечного продукта (соединения  $A_n B_m$ ) без учета экранирования поверхности продуктами реакции

$$\alpha_0(t) = \frac{1}{2V} \int_0^t \frac{dS(t')}{dt'} \sqrt{2D(t-t')} dt, \quad (76)$$

где  $V$  — объем порошка;  $D$  — коэффициент диффузии. Множитель "1/2" перед интегралом — вероятность того, что новая поверхность компонента  $A$  граничит с компонентом  $B$ . При экспоненциальном законе роста поверхности  $S(t)$  получим:

$$\alpha_0(t) = \frac{S_0}{2V} \left[ \sqrt{\pi D \tau} e^{t'/\tau} \operatorname{erf} \left( \sqrt{\frac{t}{\tau}} \right) - \sqrt{2Dt} \right] \quad (77)$$

(была использована подстановка  $t - t' = x^2$ ). С учетом экранирования получим  $d\alpha = (1 - \alpha)d\alpha_0$ , откуда объемная доля продукта реакции  $\alpha(t) = 1 - e^{-\alpha_0(t)}$ . Очевидно,  $\alpha(t)$  всецело определяется временем утонения пластин  $\tau$ , т. е. частотой  $\nu_2$ .

2. *Динамический наклеп.* Деформационное упрочнение имеет место при любой механообработке, причем в случае смеси нескольких компонентов сначала преимущественно деформируется более мягкий компонент, "догоняя" по твердости остальные. Таким образом происходит выравнивание твердостей в случае, если их первоначальные значения соизмеримы. При несоизмеримых твердостях, например, в процессе приготовления композита Al + SiC, очень твердые включения карбида кремния не деформируются пластически, но выступают в роли "абразива", кромсающего мягкую алюминиевую матрицу и создающего в ней дополнительный наклеп. Помол алюминия без абразива также приведет к наклепу, но более медленному.

Из литературы [5, 6] известна зависимость предела текучести (напряжения пластического течения) от степени пластической деформации  $\varepsilon$  при испытаниях поликристаллического образца на растяжение:

$$\sigma_T = \sigma_0 + \alpha \varepsilon^n, \quad (78)$$

где  $n \approx 0,3$  при умеренных деформациях ( $\varepsilon < 0,3$ ) и  $n \rightarrow 1$  при очень больших деформациях ( $\varepsilon \approx 10$ ).

Здесь  $\varepsilon = \int \frac{dl}{l} = \ln \frac{l_2}{l_1}$ , где  $l_1$  и  $l_2$  — начальная и конечная длины образца.

Вероятно в случае помола аналогом  $\varepsilon$  должна быть величина  $\frac{\nu_1 t}{2}$  (деформация растяжения-сжатия раскладывается на два равных ей по величине сдвига). Отсюда можно ожидать зависимости твердости от времени обработки:

$H_V = H_{V0} + \alpha \left( \frac{\nu_1 t}{2} \right)^n$ . Это уравнение можно спрямить в координатах  $\ln(H_0 - H_V)$ ,  $\ln t$  и экспериментально определить степень  $n$ . Имеются некоторые экспериментальные указания на то, что шары в отношении наклепа более эффективны, чем квазицилиндрическое мелющее тело, шары значительно выигрывают именно по частоте  $\nu_1$  (частые и слабые удары вместо редких и сильных у квазицилиндрического мелющего тела). Предположительно, динамический наклеп — пример процесса, управляемого частотой  $\nu_1$ .

3. *Механообработка смеси Fe—B.* Твердость бора  $H_V \approx 50000 \frac{\text{Н}}{\text{мм}^2}$  (половина твердости ал-

маза), что значительно больше твердости железа. При ударах пластичная матрица железа обтекает недеформируемые частицы бора. В отличие от случая Al—SiC, есть термодинамический напор к образованию боридов (кристаллических или аморфных), т. е. к перемешиванию компонентов на атомном уровне (теплота образования боридов порядка  $-20$  кДж/(г-ат.)), но кинетически реакция сильно заторможена. Взаимная растворимость и диффузия компонентов друг в друге практически отсутствует (коэффициент диффузии бора в железе  $D \sim 10^{-19}$  см<sup>2</sup>/с при 400 °С). Однако при продолжительных помолах (2—3 ч в АГО-2У) бориды все же образуются прямо в барабане *in situ*.

Предположим сначала реакционный контроль процесса. Частицы бора равноосные, примем для простоты их кубическую форму с ребром  $L$  (рис. 5). При сдвиге  $\lambda$  на грани частицы образуется свежая поверхность контакта площадью  $Ld$ , где  $d = \frac{L}{2} \lambda$ . Допустим, в результате трения компонентов друг о друга на свежей, вновь открывшейся поверхности раздела фаз образуется тонкий слой борида толщиной

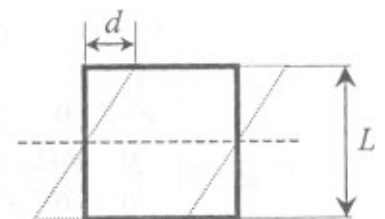


Рис. 5. Схема железной матрицы, обтекающей при сдвиге недеформируемую частицу бора



$h$  (например,  $h = 5 \dots 10 \text{ \AA}$ ), после чего этот участок поверхности пассивируется и слой бориды на нем не нарастает. С противоположной стороны грани слой ранее образовавшегося бориды того же объема срывается с поверхности частицы бора и уходит в железную матрицу. Если в матрице такие чешуйки бориды сталкиваются, они слипаются и рекристаллизуются, т. е. включения бориды растут. Сами же частицы бора постепенно растворяются с поверхности.

Без учета экранирования продуктами реакции можем написать для объемной доли бориды  $\alpha_0$ :

$$\frac{d\alpha_0}{dt} = N_6 \frac{\langle \lambda \rangle \frac{L^2}{2} h v_0 \frac{2}{3}}{V} = \frac{S_0 h}{3V} v_1, \quad (79)$$

где  $N$  — число частиц бора;  $V$  — объем порошка;  $S_0 = 6L^2N$  — общая площадь поверхности частиц (у каждой частицы шесть граней); множитель "2/3" учитывает, что сдвиг, например, в плоскости ( $xy$ ), затрагивает две пары граней куба из трех. Итак, при реакционном контроле процесс контролируется частотой  $v_1$ .

Рассмотрим теперь случай диффузионного контроля процесса. Пластичная матрица железа при ударах совершает хаотические броуновские смещения относительно грани частицы бора. Время  $t_c$  пребывания некоторой точки матрицы в контакте с гранью частицы бора определяется из условия  $\langle d^2 \rangle > \frac{2}{3} v_0 t_c \approx \left(\frac{L}{2}\right)^2$ , где

$\frac{2}{3} v_0 t_c$  — число броуновских смещений. Поскольку  $d = \lambda \frac{L}{2}$ , получаем  $t_c = \frac{3}{2v_2}$ . За это время диффузионным путем (бор диффундирует через слой бориды к железу) нарастает слой бориды толщиной  $h = \sqrt{2Dt_c}$ , где  $D$  — коэффициент диффузии. За время  $t_c$  происходит сброс слоя бориды со всей грани. Отсюда

$$\frac{d\alpha_0}{dt} = N_6 \frac{L^2 h}{V t_c} = \frac{S_0}{V} \sqrt{\frac{2D}{t_c}} = \frac{S_0}{V} \sqrt{\frac{4}{3} D v_2}. \quad (80)$$

Таким образом, при диффузионном контроле производительность определяется частотой  $v_2$ . Применительно к случаю диффузионного контроля имеет смысл заметить, что скорость образования продуктов реакции в мельнице за счет обычной (а не какой-нибудь

экзотической — баллистической и пр.) диффузии может на два порядка превышать ту же скорость в стационарных условиях. В системе Fe—В при неподвижном расположении частиц железа и бора друг относительно друга атомы бора были бы вынуждены диффундировать к железу через толстый и все время растущий слой бориды. В мельнице же образовавшиеся на границе раздела фаз диффузионным путем очень тонкие ( $5-10 \text{ \AA}$ ) слои бориды непрерывно скалываются и удаляются, вновь обнажая и приводя в контакт чистые поверхности железа и бора, т. е. отпадает необходимость в диффузии через толстые слои продукта реакции. Тонкие же слои бориды даже при крайне низком коэффициенте диффузии нарастают относительно быстро. Например, если  $t_0 \sim 1/v_0$  — период скалывания тонкого слоя бориды, то за время  $t$  в условиях мельницы нарастает слой бориды толщиной  $h_1 = \sqrt{2Dt_0} \frac{t}{t_0}$ , тогда как в стационарных условиях  $h_0 = \sqrt{2Dt}$ . В результате объем образовавшегося бориды увеличивается в  $h_1/h_0 = \sqrt{t/t_0}$  раз, где  $t$  — время помола, т. е. приблизительно на 2—3 порядка. Примерно такова же природа ускорения диффузионно контролируемых превращений и для смеси нескольких пластичных компонентов по механизму утонения "рулета", рассмотренному выше.

## Заключение

Предложена модель геометрических изменений в обрабатываемом материале под действием последовательности хаотически ориентированных чистых сдвигов или эквивалентных им пластических деформаций общего вида, в которой ключевое значение имеет скорость расплющивания исходно равноосного включения из пластичного материала.

На основе развитых представлений введены понятия механических частот нулевого, первого и второго порядков, характеризующие интенсивность пластической деформации среднестатистического микрообъема порошка. Для ряда практически важных случаев показана связь с этими частотами кинетики деформационного упрочнения порошка и фазовых превращений, протекающих в механо-реакторе.

Следует подчеркнуть весьма важную особенность диффузионно контролируемых превращений в активаторе по сравнению со стационарными условиями — исчезновение необходимости диффузии компонентов через толстые слои продуктов реакции. Именно этот этап контролирует скорость превращения при неподвижном расположении компонентов относительно друг друга. В механореакторе же из-за расплющивания пластичных компонентов или обтекания пластичной матрицей жесткого включения непрерывно соз-

дается свежая поверхность контакта за счет утонения включений или скалывания продуктов реакции. Поэтому диффузия, в основном, идет на короткие расстояния, что ускоряет превращение в 100—1000 раз.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

5. Nasu T., Nagaoka K., Sekuchi T., Sakurai M. EXAFS study on solid state amorphization process of Ni—Nb alloy by mechanical milling // J. of Non-Crystalline Solids. V. 117—118. 1990. P. 725—728.
6. Физическое металловедение / Под ред. Р. У. Кана и П. Хаазена. Т. 3. М.: Металлургия. 1987. 130 с.

## МЕТОДЫ АНАЛИЗА И ИСПЫТАНИЙ МАТЕРИАЛОВ

УДК 681.7.076.2

### ВЗАИМОСВЯЗЬ НЕКОТОРЫХ СТРУКТУРООПРЕДЕЛЯЮЩИХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СТЕКОЛ НАТРИЕВОСИЛИКАТНОЙ СИСТЕМЫ

Е. Ф. МЕДВЕДЕВ  
РФЯЦ-ВНИИЭФ

*Рассмотрена взаимосвязь параметров стекол на основе  $\text{Na}_2\text{O}$ — $\text{SiO}_2$  системы: силикатного модуля, фактора связности структуры, фазового и свободного объемов, стандартного изобарно-изотермического потенциала. Доказано, что силикатный модуль следует рассматривать не как тривиальное математическое выражение, определяющее соотношение основных компонентов  $\text{SiO}_2$  и  $\text{Na}_2\text{O}$ , а в качестве структуроопределяющего критерия. Получены выражения связи указанных параметров. Экспериментально подтверждено, что в системе  $\text{Na}_2\text{O}$ — $\text{SiO}_2$  высока вероятность фазового разделения и образования силикатов разной стехиометрии и структуры.*

#### Введение

Стеклообразное состояние характерно для многих веществ. Его уникальность заключается в том, что соотношение меры упорядоченности и аморфности структуры изменяется в широких пределах, но "понимание природы стеклообразного состояния встречается до сих пор затруднения не только в структурном плане, но и с точки зрения термодинамического описания" [1].

Пожалуй, силикаты натрия — классический пример стеклообразующих веществ. Несмотря на то, что двойная  $\text{Na}_2\text{O}$ — $\text{SiO}_2$  система хорошо изучена, она по-прежнему остается интересным объектом исследования. Так, в работах [1—3] рассматриваются вопросы моделирования структуры силикатных расплавов, явления ли-

квации и другие аспекты. Закономерностям образования водородных связей и исследованию влияния температуры на интенсивность поглощения структурно-связанной воды в стеклах посвящена работа [4]. Вопросы кристаллизации изложены в [1, 5—7]. Взаимосвязь прочности и структуры рассмотрена в [8]. Результаты изучения диффузии ионов в стекле представлены в [9, 10]. На основе системы  $\text{Na}_2\text{O}$ — $\text{SiO}_2$  разрабатываются составы стекол для водородных микроконтейнеров, применяющихся в лазерной физике [11].

В данной работе рассматриваются следующие параметры силикатов натрия: силикатный модуль  $n_{\text{Si}}$  (иногда модуль обозначают буквой  $M$  как и мольную массу), фактор связности структуры  $Y$ , объемы фазы  $V_{\text{ф}}$  и свободный