

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СИЛИКАТНЫХ КРОН

А.С. Кузаков, М.Д. Зимин

STUDYING OPTICAL ABSORPTION OF SILICATE CRONES

A.S. Kuzakov, M.D. Zimin

Сегодня аморфные материалы являются крайне актуальным объектом исследования. В первую очередь это связано с их уникальным строением. Отсутствие дальнего порядка в структуре приводит к тому, что стекла и другие аморфные материалы весьма многообразны и зачастую имеют весьма оригинальные свойства. Теоретическое изучение строения аморфных материалов во многом базируется на их сопоставлении с кристаллами. Но существует подход, основанный на вероятностном структурировании стекол с учетом их термодинамических параметров. Этот подход носит название – стохастическое моделирование.

Amorphous materials are currently burning objects for scientific enquiry that primarily stems from their unique structure. The absence of long-range order in the structure results in the fact that glasses and other amorphous materials are quite various and often have quite special properties. Theoretical research of structures of amorphous materials is largely based on the comparison with crystals. But there is an approach based on the probabilistic structuring of glasses with consideration for their thermodynamic parameters. This approach is known as stochastic modeling.

В данной работе осуществлен синтез силикатных крон состава $\text{SiO}_2 \cdot \text{Na}_2\text{O}$, легированных железом (+3), исследовано оптическое поглощение натриевой силикатной кроны с применением стохастического моделирования.

Сами по себе силикаты натрия в отличие от чистого плавленого кварца активно поглощают УФ-диапазон электромагнитных волн. Это поглощение связано с резким возрастанием в кроне люминесцирующих I-центров (рис. 1).

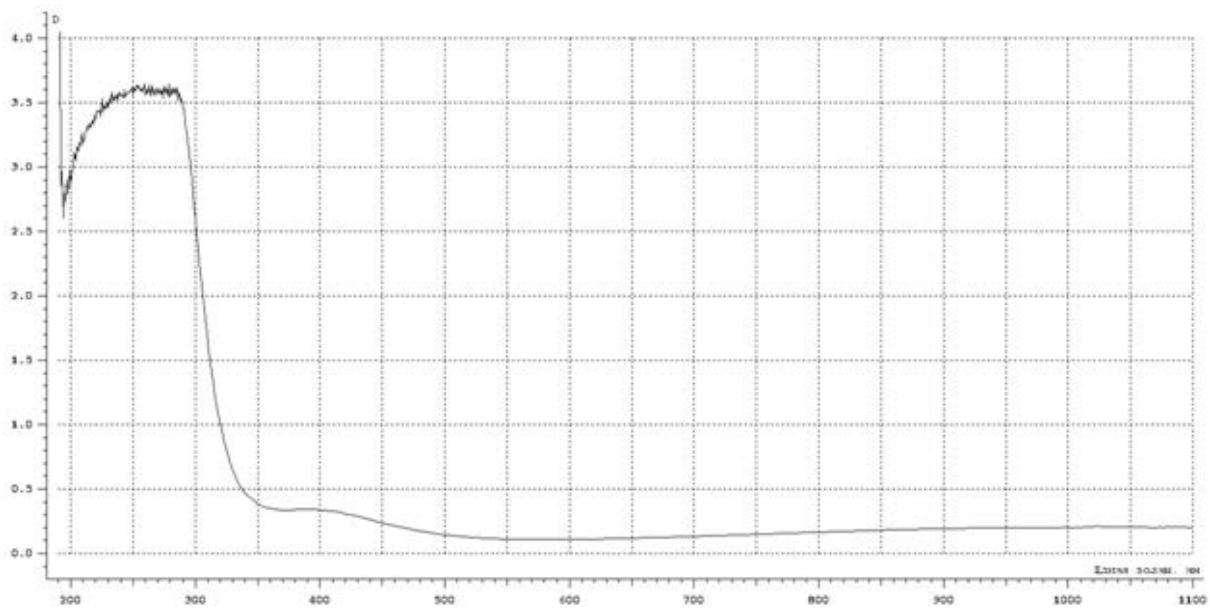


Рис. 1. Экспериментальный спектр поглощения силикатной кроны с примесью железа в модифицирующих концентрациях (менее 1 %).

В литературе широкая полоса поглощения I-центров объясняется множественными электронными уровнями, возникающими из-за многообразного структурного окружения «хвостовых» кислородов [Немилов, 2011]. Стохастическое моделирование показывает, что в ходе линейной релаксации кварцевой кроны возможно протекание процесса по нескольким релаксационным сценариям, из которых можно выделить пять наиболее вероятных (рис. 2).

Наиболее вероятным релаксационным сценарием легированной железом кварцевой кроны является жесткая стабилизация «хвостовых» кислородом катионом щелочного металла. Вероятность такой стабилизации составляет около 47 %. При этом структурные вариации такого классического I-центра соответствуют наиболее вероятному энергетическому переходу с длиной волны 220 нм. Вероятность около 33 % имеет образование I-центров, в которых

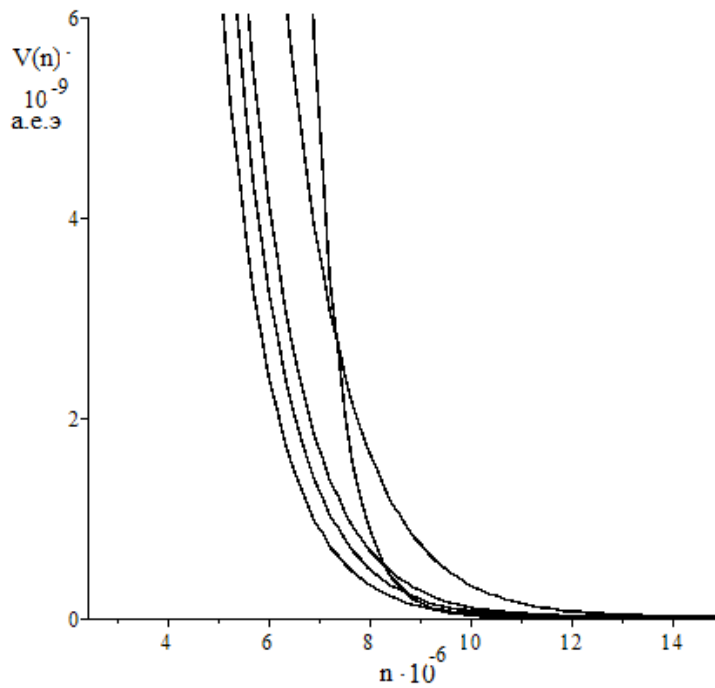


Рис. 2. Наиболее вероятные релаксационные сценарии силикатной кроны с примесью железа(+3).

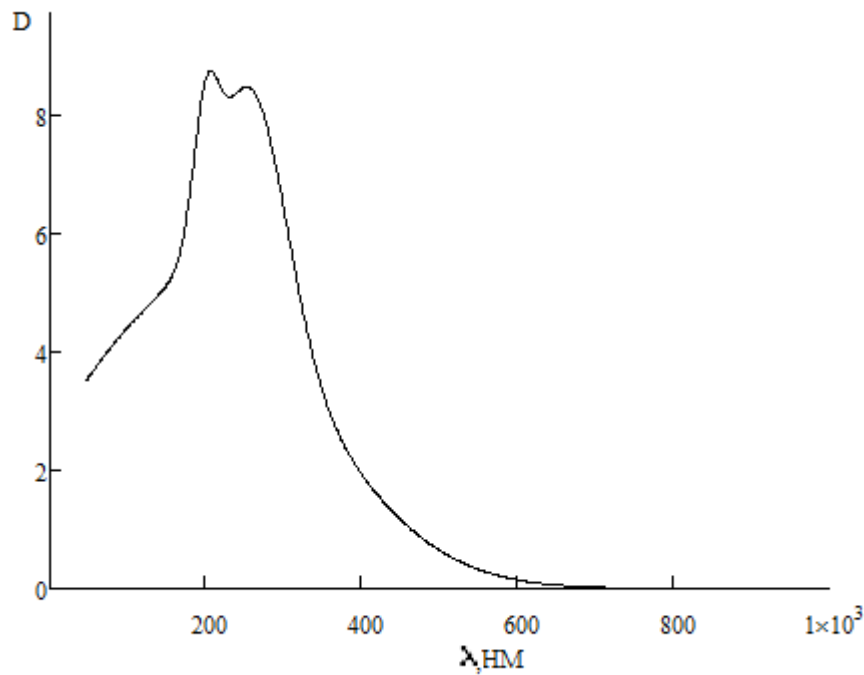


Рис. 3. Стохастически смоделированный спектр поглощения I-центров силикатной кроны.

«хвостовой» атом стабилизирован катионом трехвалентного железа. Наиболее вероятный структурный переход соответствует полосе с длиной волны в 240 нм. Помимо этого возможно образование I-центров как продуктов разрыва пероксидных мостиков в кварце. В силикатной кварцевой кроне такой механизм образования I-центров наименее вероятный (около 20 %). Структурные переходы для подобных I-центров соответствуют широкой полосе

поглощения с пиком на 180 нм. Проанализировав вероятности различных механизмов образования I-центров в кварцевой кроне можно смоделировать возможный спектр поглощения кварцевой кроны (рис. 3), который накладывается на спектр поглощения катионов железа, обусловленного электронными переходами в самих катионах.

Полученный спектр поглощения согласуется с экспериментом и литературными данными [Rubin, 1985],

что говорит об адекватности стохастического моделирования оптических свойств силикатной кроны.

Стохастическая модель силикатной кроны адекватно описывает оптическое поглощение этого материала, обусловленное наличием I-центров. Согласно моделированию I-центры образуются за счет стабилизации «хвостовых» кислородов катионами щелочных металлов и катионами железа(+3). Образование I-центров возможно также за счет распада пероксидных групп в кварце, однако такой механизм не является преобладающим. I-центры образованные различными механизмами имеют различные линии поглощения за счет разных структурных вариаций в аморфной системе.

Работа выполнена в рамках базового проекта фундаментальных научных исследований СО РАН П.10.1.6. «Механизмы экстремального неразрушающего взаимодействия твердых диэлектриков с интенсивным лазерным излучением».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Немилов С.В. Оптическое материаловедение: оптические стекла / Учебное пособие, Санкт-Петербург, 2011.

Rubin M. Optical properties of soda lime silica glasses // Solar Energy Materials. 1985. V. 12. P. 275–288.

Иркутский филиал института лазерной физики, Иркутск, Россия