

MÔ HÌNH HÓA TRÊN MÁY TÍNH CẤU TRÚC VÀ CÁC TÍNH CHẤT VẬT LÝ CỦA SiO_2 LỎNG VÀ VÔ ĐỊNH HÌNH

Võ Văn Hoàng, Belashchenko D.K, Võ Thị Mai Thuận*

Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG T.PHCM

* Moscow Steel and Alloys Institute, Russia

Tóm tắt:

Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của cấu trúc và các tính chất vật lý của SiO_2 lỏng và vô định hình được mô hình hóa bằng phương pháp Hồi phục tĩnh và Động lực học phân tử. Sự phụ thuộc của phân bố vacancy và nhiệt dung đẳng áp vào nhiệt độ được xác định. Chuyển pha từ SiO_2 lỏng sang VĐH là chuyển pha loại 2 với nhiệt độ chuyển pha khoảng 1700 K, hệ số dẫn nở nhiệt tính được cho mô hình SiO_2 có giá trị phù hợp thực nghiệm.

COMPUTER SIMULATION OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE LIQUID AND AMORPHOUS SiO_2

Vo Van Hoang, Belashchenko D.K, Vo Thi Mai Thuan*

Department of Physics, University of Natural Sciences - VNU.HCM

* Moscow Steel and Alloys Institute, Russia

Abstract:

The temperature dependence of the structure and properties of the liquid and amorphous SiO_2 has been simulated by the Statical Relaxation and Molecular Dynamic methods. The temperature dependence of the pore distribution and heat capacity also calculated and presented. The phase transition from the liquid to the amorphous states is determined as the second order phase transition at anywhere around temperature 1700 K, the calculated coefficient of thermal expansion agrees well with the experimental one.