
上海光机所在分子动力学模拟光致热折变玻璃结构性质方面获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24182.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院上海光学精密机械研究所高功率激光单元技术实验室

Development of bromine-related potentials for molecular dynamics simulations of the oxyhalide photo-thermo-refractive glass为题，发表在《国际陶瓷》（Ceramics International）上。

光致热折变（PTR）玻璃经过紫外辐照和热处理后其折射率会发生改变，被广泛应用于各类光学器件中。然而，由于光致热折变（PTR）玻璃组成多、工艺复杂，对这类玻璃材料的结构-性质关系研究往往受到微观尺度的限制。分子动力学模拟在揭示玻璃性质的结构起源方面发挥着越来越重要的作用。

本研究开发了能描述PTR玻璃中溴元素的分子动力学势函数，根据模拟结果解析了PTR玻璃的结构信息。此外，该工作还模拟了热处理时PTR玻璃中富氟-溴区域的生长过程，发现了溴更倾向于停留在氟团簇周围并在富氟相和富氧玻璃基体之间形成相界；而钠离子在氟-溴富集区的存在会增加这些区域的聚集趋势，导致氟-溴团簇尺寸的增大，促进玻璃折射率改变。

该研究揭示了PTR玻璃的结构和转变过程，有助于从根本上剖析材料的性质机理，为PTR玻璃的研发提供参考，并为相关研究提供新的模拟方法。

[论文链接](#)

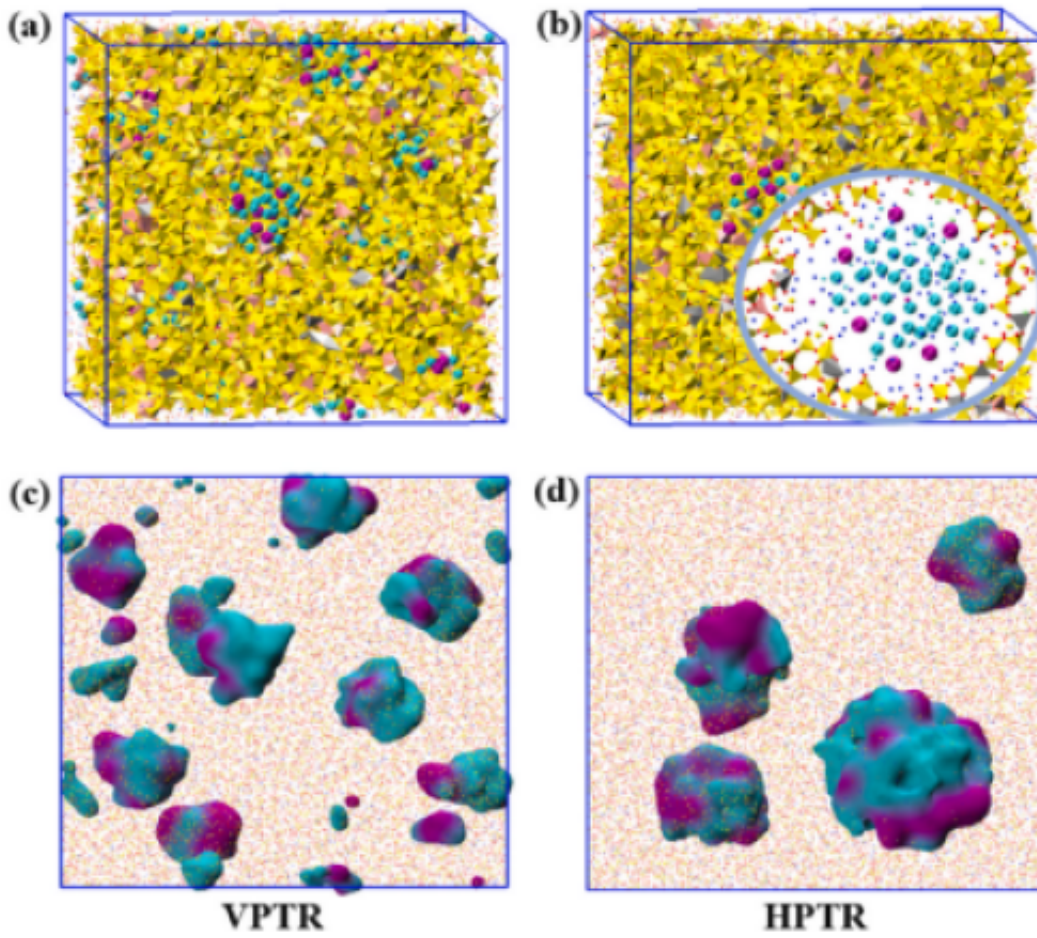


图1. 模拟热处理前 (a) (c)、热处理后 (b) (d) 的PTR玻璃结构和元素分布。青色、紫色、黄色、粉色分别代表氟、溴、硅、铝元素。

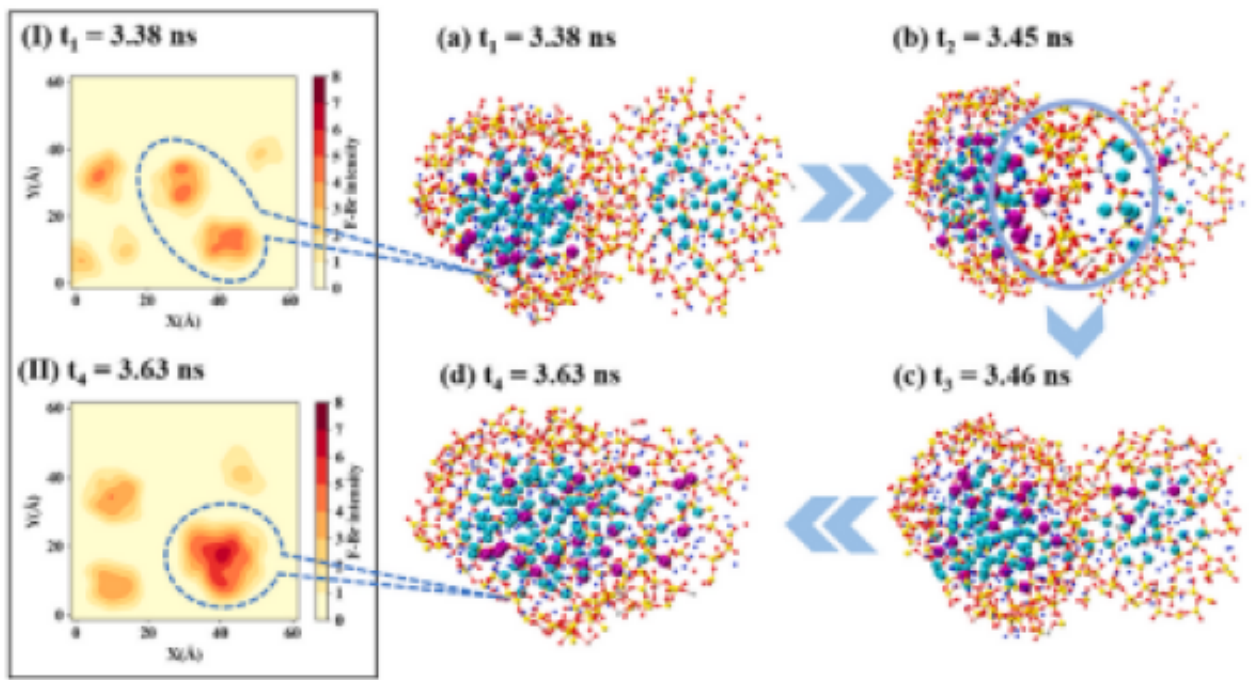


图2. 模拟PTR玻璃热处理时氟-溴团簇的融合过程。青色，紫色，黄色，蓝色，红色分别代表氟、溴、硅、钠、氧元素。

研究团队单位：上海光学精密机械研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发