

文章编号:1672-3392(2007)04-0079-02

用 Delphi 实现硫属玻璃物理性质计算与配方设计

曹 嵩¹ 胡向平²

(1 清华大学软件学院, 北京 100084; 2 湖北华光新材料有限公司, 襄樊 441057)

摘要 硫属玻璃是具有优良红外透过性质的光学材料。为了便于硫属玻璃系统的研究和设计, 采用现有的玻璃性质计算理论, 运用 Delphi 语言编程设计实现了硫属玻璃的物理性质计算及配方设计程序。

关键词 硫属玻璃; 物理性质; 配方设计; Delphi 编程

中图分类号 TP312 **文献标识码** A

1 引言

随着光电技术的飞速发展, 相应的光电子器件对光学材料提出了更高的要求。尤其是近年来红外技术和激光技术的综合应用, 需要更宽波段的光学材料来满足透过近、中、远红外以及激光等共用窗口的需求。硫属玻璃是具有优良的红外透过性质的光学材料, 透过波段范围为 $0.9 \sim 15 \mu\text{m}$, 可以覆盖近、中和远红外三个波段, 在设计上可以满足三光合一通道设计的要求, 而且具有较好的消色差特性^[1-3]。

与目前国内常用的红外光学材料, 如 Ge、ZnSe、ZnS 等宽波段光学晶体相比, 硫属玻璃光学均匀性好, 可以熔铸成满足光学设计要求的各种形状和较大的尺寸产品, 且具有可调性, 制造成本较低, 生产周期短。

由于硫属玻璃的各项性能与传统的光学玻璃有较大的差异, 为了便于对硫属玻璃系统的研究和设计, 运用 Delphi 语言设计实现了硫属玻璃的物理性质计算及配方设计程序。

2 性质计算和配方设计的理论基础

As_2S_3 和 As_2Se_3 为玻璃生成体化合物, 它们以三角体 $[\text{AsS}_3]$ 和 $[\text{AsSe}_3]$ 组成层状或链状的玻璃网络结构。以往这类非氧化物玻璃都是以 As_2S_3 和 As_2Se_3 为基础的。在简单二元系统 $\text{As}-\text{S}$, $\text{As}-\text{Se}$, $\text{As}_2\text{S}_3-\text{As}_2\text{S}_3$, $\text{As}_2\text{Se}_3-\text{As}_2\text{Te}_3$ 以及三元系统 $\text{As}_2\text{Se}_3-\text{As}_2\text{Te}_3-\text{Ti}_2\text{Se}$ 中某些物理

化学性质如硬度、软化温度和溶解度等变化曲线有极大值、极小值及曲折点, 而一些物理性质, 如折射率及密度是线性变化^[1]。由于这类非氧化物玻璃是由多种金属元素、半金属元素和卤族元素构成, 在制备时又常引入以单独的元素, 可用原子分数来表示玻璃的成分。因此, 硫属玻璃的部分物理性质可按照下式计算:

$$g = \sum_i \bar{g}_i r_i$$

式中, \bar{g}_i 为某原子 i 的部分性质, r_i 为此元素的原子分数。

这类非氧化物的成分是用原子分数来表达和变化的。这里我们引用了文献[2]中的部分元素原子的部分性质数据。其中, 红外折射率、密度和热膨胀系数的计算误差约为 $2 \sim 3\%$, 接近于一般测定精度, 弹性模量的计算误差较大, 约为 10% 。用计算的方法来事先估计玻璃的性质。这样不仅可以计算特定配方的硫属玻璃的物理性质, 而且可以采用不断改变玻璃配方并测试该配方是否满足物理性质的要求的方法来进行自动化配方设计。

3 用 Delphi 实现硫属玻璃性能计算与配方设计

基于上面的理论模型, 通过 Delphi 编程实现计算指定成分硫属玻璃的部分物理性质, 自动设计满足某些特定性能要求的硫属玻璃的配方以及相应的物理性质计算结果, 方便综合材料、性能等多方面因素来进行配方方案的取舍。

3.1 程序整体流程

为了实现上述设计目的,采用如图 1 所示的程序框架结构来编制程序。核心部分是利用加和原则和元素物理性质数据计算硫属玻璃的物理性质。

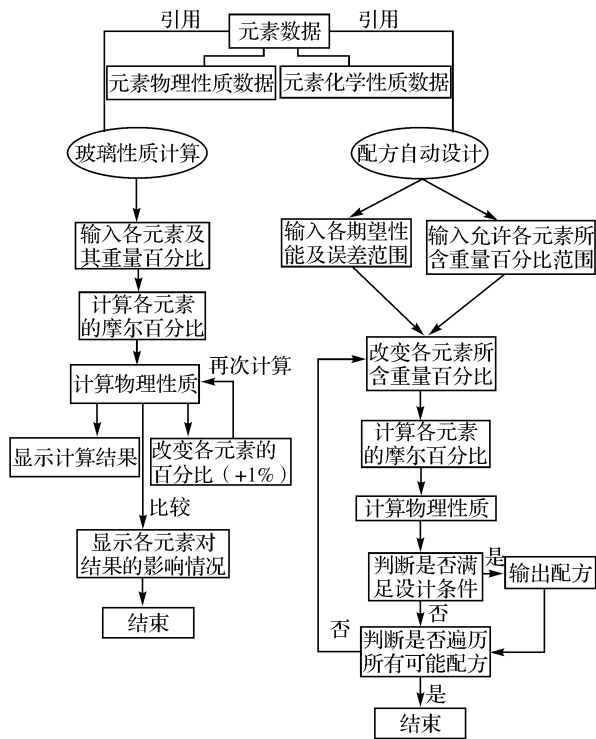


图 1 程序流程图

Fig.1 Program flow chart

3.2 结果输出

程序运行时的界面如图 2 所示,上半部分是实现硫属玻璃物理性质计算功能的模块,下半部分是实现硫属玻璃配方自动设计的模块。

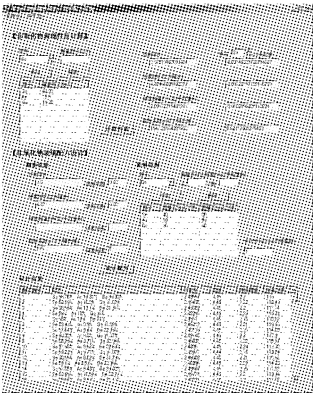


图 2 程序界面

Fig.2 Program graphic user interface

4 结 论

本文利用 Delphi 编程实现了计算硫属玻璃性能与配方设计,获得了指定成分的硫属玻璃的物理性质,可以自动设计出符合特定性能要求的硫属玻璃配方,并对于每个配方计算出相应的性能。应用程序方便、准确,简化了计算。

参 考 文 献

[1] 干福熹. 光学玻璃[M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 1982.
[2] 干福熹. 无机玻璃物理性质计算和成分设计[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1981.
[3] 明日科技. Delphi 应用开发完全手册[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2006.
[4] 熊长新, 李钱陶. 光学玻璃的强度设计方法研究[J]. 光学与光电技术. 2006, 4(5): 115-118.

A Delphi Program for Calculating Physical Properties and Designing Prescriptions for Chalcogenide Glasses

CAO Song¹ HU Xiang-ping²

(1 School of Software, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2 HuBei Huaguang New Material CO., LTD, Xiangfan 441057, China)

Abstract Chalcogenide glass is a kind of IR optical material with high optical transparency. For the convenience of researches in this area, the Delphi program for calculating physical properties and designing prescriptions for chalcogenide glass is realized by the calculating theory of property of the glass.

Key words chalcogenide glass; physical property; prescription design; Delphi programming