

Нанотехнология получения металлокерамики на основе титана

П.А. Витязь, Л.И. Гречихин¹

Институт механики и надежности машин НАН Беларуси, Минск, 220072, Беларусь

¹ Белорусский национальный технический университет, Минск, 220027, Беларусь

Рассмотрен механизм формирования кластерных металлокерамических структур. Получен потенциал межкластерного взаимодействия. Дается описание кластерных решеточных структур. Определены размеры межкластерных пустот. Установлены причины увеличения энергий связи наночастиц в металлокерамике в зависимости от вещества наполнителя. Показано, каким образом следует сформировать технологию получения металлокерамики на основе титана.

Nanotechnology for producing titanium-based cermets

P.A. Vityaz and L.I. Grechikhin¹

Institute of Mechanics and Reliability of Machines NASB, Minsk, 220072, Belarus

¹ Belarusian National Technical University, Minsk, 220027, Belarus

Consideration is given to the formation mechanism of cluster metal ceramics structures. The cluster interaction potential is obtained. Cluster lattice structures are described. The sizes of intercluster hollows are defined. We have found the causes of an increase of nanoparticle binding energy in cermets depending on the filling agent. It is shown how the technology for producing Ti-based cermets should be developed.

1. Введение

Металлокерамические материалы применяются в различных областях техники (самолетостроение, судостроение, двигателестроение), медицине и в ряде других областей народного хозяйства. Особое значение отводится металлокерамике на основе титана. Такие керамики представляют собой твердые двухфазные сплавы на основе карбида титана ($Ti-\alpha\%C$), алюминида титана ($Ti-\beta\%Al$), а также трехфазный сплав вида $Ti-\alpha\%C-\beta\%Al$. Технология получения таких металлокерамик является сложной и трудоемкой, что обусловлено отсутствием четко разработанной физико-химической модели формирования металлокерамических материалов. В результате технология получения таких материалов не позволяет получить хорошо воспроизводимые результаты с заданными свойствами. Это сдерживает их более широкое применение в народном хозяйстве.

В этой связи возникает задача выяснить: 1) механизм формирования кластерных частиц; 2) как такие частицы взаимодействуют друг с другом; 3) каким образом они распределены в пространстве; 4) какой формы и размера образуются межкластерные пустоты основного материала и 5) какими частицами следует заполнять такие пустоты. Только на основе полученных сведений можно

правильно сформулировать физико-химическую модель строения металлокерамики и разработать оптимальную технологию ее изготовления. Ниже последовательно рассмотрим поставленную проблему применительно к металлокерамике на основе титана.

2. Формирование структуры кластерных частиц исходных материалов

Кластерная модель конденсированного состояния изложена в работах [1–5]. Ближний порядок образует кластер, а в свободном пространстве находятся исходные частицы вещества, которые совершают трансляционное движение между кластерами. Плотность упаковки частиц в кластере соответствует плотности упаковки кристалла (0.68–0.74). Плотность упаковки свободных частиц вещества в межкластерном объеме составляет 0.44–0.47 [4].

Взаимодействие с первой координационной сферой формирует кластер с наиболее плотной упаковкой частиц и с наибольшей энергией связи. Это основной кластер, который содержит 7 атомов в случае простой кубической структуры; 9 атомов в случае объемноцентрированной структуры и 13 атомов содержится в гранецентрированной структуре. Основной кластер, взаимодейст-

вудя со свободными атомами межкластерного объема, может увеличиваться в размерах. Энергия связи свободного атома с кластером определяется ковалентной связью и энергией физической адгезии, определяемой электронами второй и последующей кратности ионизации с ближним окружением ячейки адгезии. При низких температурах свободные атомы в межкластерном объеме отсутствуют. Межкластерное взаимодействие уплотняет структуру и тогда каждый атом обладает энергией связи, которая обусловлена ковалентной связью со всеми атомами всех трех координационных сфер с учетом их коэффициента видности [6]. В этом случае все вещества, в том числе и металлы, представляют собой ковалентные кристаллы. Формируется некое замороженное состояние с плотной упаковкой наночастиц, когда граница между частицами исчезает и отсутствует между ними свободное пространство.

Разрыв связи с третьей координационной сферой приводит к тому, что монокристаллический кристалл начинает распадаться на отдельные кластеры. В кристалле возникают межкластерные пустоты, которые заполняются свободными атомами, включаются межкластерные взаимодействия и начинается формирование решеточной кластерной структуры.

Кластер объемноцентрированной структуры представляет собой четырехгранную бипризму, а гранецентрированная структура — трехгранную бипризму [6]. По мере распада монокристаллического состояния при низких температурах на отдельные кластеры энергия связи частиц второй и третьей координационных сфер существенно изменяется, но расположение частиц в структуре остается неизменным.

Энергия связи частиц второй и третьей координационной сферы с кластером выше, чем ковалентная связь между центральной частицей и этими же частицами в монокристалле при абсолютном нуле температуры. В результате общая энергия связи, приходящаяся на одну частицу в монолите, меньше, чем в кластерном образовании. В нормальных условиях энергия связи частиц определяется только бинарным взаимодействием частиц в основном кластере и основного кластера со свободными частицами межкластерного объема.

Потенциал бинарного взаимодействия имеет вид [6]:

$$E_{\text{св.рез}} = \begin{cases} -\frac{2E_{\text{св}}R_0^6}{r^6} + \frac{E_{\text{св}}R_0^{12}}{r^{12}} & \text{при } r \leq R_0, \\ \sum_{i=1}^3 N_i \kappa_i^2 \left[\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 Z_{a,k}^* Z_{b,l}^* \int_{(a)} \int_{(b)} \rho_{e,a}(\epsilon_k) \rho_{e,l}(\epsilon_l) \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1+S} \right) d\epsilon_k d\epsilon_l + \frac{\theta_i e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{p_3^2 (\alpha_i N_i)}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right] & \text{при } r > R_0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь R_0 — равновесное расстояние между взаимодействующими частицами; $E_{\text{св}}$ — результирующая энергия связи на равновесном расстоянии; N_i — число частиц в i -й координационной сфере; κ_i — коэффициент видности; $Z_{a,k}^*$, $Z_{b,l}^*$ — эффективные заряды взаимодействующих частиц; $\rho_{e,a}(\epsilon_k)$, $\rho_{e,b}(\epsilon_l)$ — распределение электронной плотности вокруг силовых центров взаимодействующих частиц в k -м и l -м энергосостоянии; $H_{1,1}$, $H_{1,2}$ и S соответственно интегралы кулоновский, обменный и перекрытия; θ_i — доля ионной связи; p_3 — дипольный электрический момент и α_i — структурный коэффициент ионного кристалла.

Энергия диссоциации двухатомных молекул в соответствии с (1) приведена в табл. 1.

Наибольшая энергия связи реализуется для бинарной связи Ti–C. Связь титана с алюминием почти в три раза меньшая. Если получение металлокерамики происходит в окружающей атмосфере, то необходимо учитывать образование оксидных образований типа TiO, CO и AlO. Бинарные образования разнородных частиц обладают значительным дипольным электрическим моментом.

Энергия связи частиц второй координационной сферы соответствует тепловой энергии частиц при температуре плавления. Интенсивный разрыв энергии связи частиц третьей координационной сферы с кластером происходит при особой температуре. При этой температуре скачком изменяются тепловые свойства кристалла исходных веществ. Взаимодействие с частицами первой, второй и третьей координационных сфер в кристаллическом состоянии формирует кластерное образование.

Количество частиц в кластере определяется следующим образом:

$$N_{\text{кл}} = \sum_{i=1}^4 W_i N_i, \quad (2)$$

где N_i — число частиц в i -й координационной сфере и W_i — вероятность того, что частица вещества связана с кластером и не находится в свободном пространстве, совершая трансляционное движение. Эта вероятность находится из распределения Максвелла–Больцмана, т.е.

$$W_i = \int_0^{E_{\text{св},i}} f(E, T) dE. \quad (3)$$

Таблица 1

Энергия бинарной связи между элементами, входящими в состав металлокерамики на основе титана (эВ) и дипольные электрические моменты (ДЭМ) (10^{29} Кл·м)

Параметры		Элемент			
		Ti	C	Al	O
Ti	Ков.	4.690	6.080	1.490	5.869
	Ион.	0.167	1.067	0.333	1.146
	Рез./Эксп.	4.857/4.9	7.147	1.823	7.015/7.0
	ДЭМ/Эксп.	0	2.76	2.13	2.89
C	Ков.	6.080	2.193	2.344	4.379
	Ион.	1.067	5.217	0.623	5.697
	Рез./Эксп.	7.147	7.41/7.41	2.967	11.08/11.09
	ДЭМ/Эксп.	2.76	0	1.32	1.81/0.033
Al	Ков.	1.490	2.344	2.781	1.122
	Ион.	0.333	0.623	0.445	4.137
	Рез./Эксп.	1.823	2.967	3.226/3.23	5.26/5.14
	ДЭМ/Эксп.	2.13	1.32	0	7.83

В качестве примера в табл. 2 приведены результаты расчета количества частиц в кластере для кристаллического и жидкого состояния алюминия в зависимости от температуры. При высоких температурах число частиц в кластере практически совпадает с данными работы [4].

Количество связанных частиц в кластере с ростом температуры падает по линейному закону, а количество свободных частиц, приходящихся на один кластер, возрастает по линейному закону [6]. Третья координационная сфера на формирование кластеров в кристалле алюминия никакого влияния не оказывает. При температуре кипения кластеры формируются только в результате взаимодействия с первой координационной сферой и общее число частиц в кластере не превышает пяти. Остальные 15 частиц ближайшего окружения вблизи каждого кластера находятся в межкластерном пространстве в свободном состоянии. Энергия связи свободных частиц в межкластерном пространстве обусловлена преимущественно бинарным взаимодействием, тогда как в кластере энергия связи частиц определяется коллективным взаимодействием. Только в критическом состоянии кластеры полностью распадаются. Получается, что в жидком состоянии уже присутствуют связи, харак-

терные для газов, а в критическом состоянии вообще пропадает разница между жидкостью и газом.

Кластер следует рассматривать как некую макромолекулу. Это обусловлено тем, что в конденсированной среде энергетические состояния валентных электронов различных частиц данного вещества интенсивно перемешиваются и образуют единое электронное облако вблизи уровня Ферми. Поэтому взаимодействие между кластерами осуществляется ковалентной связью и обменным взаимодействием свободными атомами.

3. Межкластерное взаимодействие

Диаметр кластера для гранцентрированной и объемноцентрированной структур составляет $\sim 3R_0$ (R_0 — расстояние между частицами внутри кластера). Тогда энергия ковалентной связи между такими макромолекулами находится по упрощенной формуле вида:

$$E_{\text{ков}} = \sum_i k_i \chi_i \left(\frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1 + S} \right)_i, \quad (4)$$

где суммирование производится по всем степеням ионизации взаимодействующих частиц с коэффициентом видности k_i и эффективным зарядом χ_i .

Таблица 2

Зависимость числа частиц в кластере в кристаллическом и жидком состояниях алюминия от температуры и энергия межкластерной связи (эВ)

Вещество	Температура, K														
	298			928			953			1153			1573		
	1-я	Рез.	[5]	1-я	Рез.	[5]	1-я	Рез.	[5]	1-я	Рез.	[5]	1-я	Рез.	[5]
Al	9.86	14.31	—	8.62	10.7	12	8.54	10.6	9.8	7.86	9.57	9.1	6.53	7.74	7.8
	0.0905 (0.038)			0.120 (0.120)			0.122 (0.123)			0.136 (0.149)			0.161 (0.203)		

Скорость трансляционного движения равна:

$$v = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi M_a}}. \quad (5)$$

Расстояние, которое свободная частица проходит между двумя последовательными столкновениями с кластерами, для гранецентрированной структуры равно $\Delta R = 0.3092R_{\text{кл}}$, а для объемноцентрированной структуры — $\Delta R = 0.4142R_{\text{кл}}$. Учитывая, что только 1/6 часть атомов движутся в заданном направлении в свободном пространстве, на основании принципа неопределенности применительно к энергии и простой кубической структуры кластерной решетки получим следующую формулу для оценки энергии бинарного обменного взаимодействия между кластерами:

$$\Delta E_{\text{обм}} = \frac{Lh\bar{N}_{\text{кл}}/2}{\Delta R} \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi M_a}} N_n, \quad (6)$$

где N_n — количество окружающих пустот. Коэффициент 2 свидетельствует о том, что в обменном взаимодействии участвуют одновременно две частицы.

Увеличение расстояния между кластерами с ростом температуры и столкновительный член при движении частиц в межкластерном объеме учитываются коэффициентом L , который зависит от двух факторов: упругого и неупругого столкновения с образованием молекулярных структур с двумя и более атомами.

Коэффициент L представляется следующим образом:

$$L = \frac{N_0 - \sum_{i=1} N_i}{N_0} + \sum_{i=1} \frac{N_i}{N_0 \sqrt{i+1}}. \quad (7)$$

Здесь индекс $i+1$ определяет количество частиц в образовавшейся молекуле, а N_i — количество таких молекул в межкластерном объеме.

Энергию активации образования i -х молекул можно оценить по эмпирическим формулам Бенсона [7] и определить ее следующим образом:

$$E_{a,i} \approx 0.29iE_{\text{св},2}. \quad (8)$$

Зная энергию активации, легко найти количество образующихся i -х молекул в соответствии с основной формулой, описывающей кинетику протекания химической реакции:

$$\frac{dn_i}{dt} = k_{f,i} n_1 n_2, \quad (9)$$

где $k_{f,i}$ — константа прямой химической реакции, а n_1 и n_2 соответственно концентрации реагирующих частиц. Из (9) следует:

$$N_i = dn_i = k_{f,i} n_1 n_2 dt. \quad (10)$$

Применительно к нашим условиям (10) запишется так:

$$N_{i+1} = k_{f,i} N_i (N_0 - \sum_{i=1} N_i) \Delta R \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi M_a}}. \quad (11)$$

Таблица 3

Энергия бинарной межкластерной связи и размер основного кластера

Вещество	Параметры			
	$E_{\text{ков}}, \text{эВ}$	$E_{\text{обм}}, \text{эВ}$	$E_{\text{рез}}, \text{эВ}$	$R_{\text{кл}}, \text{нм}$
Al	0.009	0.079	0.089	0.86
C	0.378	0.019	0.397	0.46
Ti	0.105	0.007	0.112	0.88

Константа прямой химической реакции определяется по формуле [7]:

$$k_{f,i} = 2R^2 (2\pi k_b T / \mu)^{1/2} \exp(-E_{a,i} / k_b T), \quad (12)$$

где μ — приведенная масса реагирующих частиц.

Расчет, выполненный по формулам (4) и (12), для энергии межкластерного взаимодействия в нормальных условиях для ряда веществ приведен в табл. 3. По мере роста температуры кластерная решеточная структура постепенно упрочняется. С ростом температуры энергия теплового движения становится выше энергии межкластерного взаимодействия, а это приводит к тому, что кластеры совершают поступательное движение в жидкости как свободные частицы. Вероятность полной свободы определяется как разность $(1 - W_i)$, где W_i вычисляется по (3). Вероятность связи между кластерами не равна нулю и поэтому кластеры не разлетаются, находясь в жидком состоянии. Этот факт обуславливает существование квазикристаллической структуры расплава металла, которая сформулирована в [5]. Аналогичная ситуация имеет место и для других однородных веществ. По мере роста температуры жидкого состояния основной кластер постепенно распадается, а при температуре сублимации основные кластеры начинают интенсивно разрушаться.

Решеточные кластерные структуры расположены послойно и вставлены друг в друга так, что центры кластеров отстоят в горизонтальном и вертикальном направлениях на один монослой атомов. В нормальных условиях особую роль выполняют атомы третьего координационного слоя. Они обобщаются кластерами, которые формируются атомами первой и второй координационных сфер. Такое поведение атомов внутри кристалла является законом для кристаллического состояния.

При формировании решеточной кластерной структуры в зависимости от расположения кластеров относительно друг друга возникают межкластерные пустоты. Для ГЦК-структуры возникают пустоты $4.05R_0$, $3R_0$, $1.5R_0$, $0.5R_0$ и $0.3092R_0$, а для ОЦК-структуры — $3.63R_0$, $1.5R_0$ и $0.4142R_0$. Пустоты $4.05R_0$, $3R_0$ и $0.3092R_0$ ГЦК-структуры; $3.63R_0$ и $0.4142R_0$ ОЦК-структуры имеют сфероидальную форму, а остальные пустоты — щелевидную форму и расположены хаотически друг относительно друга. Наличие щелевидных

пустот является причиной возникновения дислокаций. Возникновение межкластерных пустот приводит к резкому ухудшению механических свойств исходных материалов. Чтобы устранить этот недостаток предлагается заполнять эти пустоты другими веществами, которые бы вступали в химическую реакцию со свободными атомами основы, образуя двухатомные молекулы со значительным электрическим дипольным моментом, так как в этом случае возникает дополнительная доля ионной связи заметной величины.

4. Упрочнение кластерной решеточной структуры титана различными наполнителями

Возникающие пустоты в кластерной решеточной структуре титана возможно заполнить путем использования методов, применяемых в порошковой металлургии. Опытным путем установлено, что наиболее жаропрочные титановые сплавы получают внедрением в решеточную структуру титана алюминия, углерода и их смеси.

4.1. Двухфазный твердый сплав $Ti-\alpha\%C$

Щелевидные пустоты $0.5R_0$ в решеточной структуре титана атомы углерода полностью заполняют и одновременно взаимодействуют с тремя кластерами, а каждый кластер с тремя атомами углерода. Бинарная ковалентная связь атома углерода с кластером титана дает значение 0.010 эВ. Доля ионной связи составляет 0.015 эВ. Результирующее значение бинарной связи — 0.025 эВ. С учетом того, что каждый кластер одновременно взаимодействует с тремя атомами углерода при полном заполнении щелевидной пустоты, имеем: $\Delta E_{св.,кл} = 0.074$ эВ. Это уже заметное увеличение межкластерного взаимодействия. В объемных межкластерных пустотах $0.3092R_0$ атомы углерода взаимодействуют одновременно с пятью кластерами титана, что составляет дополнительную энергию межкластерного взаимодействия 0.123 эВ.

В щелевидных пустотах размером $1.5R_0$ находятся свободные атомы титана. Эти атомы с атомами углерода образуют молекулу TiC. Энергия ионизации молекулы TiC составляет 7.79 эВ, а ее дипольный электрический момент — 8.3 D. Молекула TiC одновременно взаимодействует с тремя кластерами титана. Результирующая энергия бинарной связи (TiC – кластер титана) является суммой ковалентной (0.104 эВ) и доли ионной (0.011 эВ) связей и равна 0.115 эВ. Это примерно в два раза выше энергии связи между кластерами титана без углеродного наполнителя.

Большие сфероидальные пустоты заполняются основным кластером углерода и образующимися молекулами TiC. Из рис. 1, б следует, что каждый кластер титана взаимодействует с двумя молекулами TiC и одним

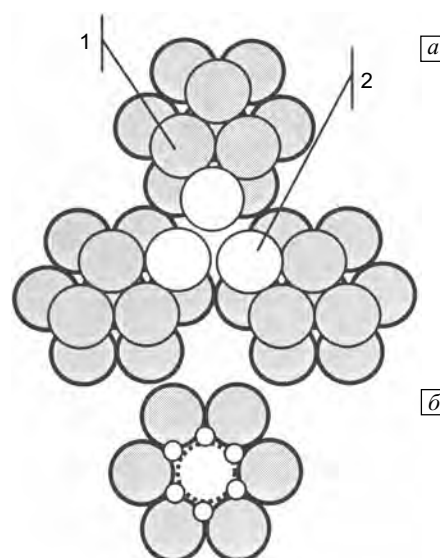


Рис. 1. Фрагмент образования сфероидальной пустоты $3R_0$ ГЦК-структуры (а) и полное заполнение пустоты наполнителем (б): 1 — основной нанокластер; 2 — второй координационный слой

основным кластером углерода. Энергия связи с молекулами TiC составляет 0.230 эВ, а с кластером углерода соответственно для пустоты $4.05R_0$ и $3R_0$ — 0.090 и 0.121 эВ. Таким образом, во всех случаях заполнения пустот углеродом происходит существенное увеличение бинарной связи. Чтобы произошло полное заполнение всех пустот в кластерной решеточной структуре титана необходимо обеспечить введение углерода в весовом составе не более $\sim 3\%$, т.е. $Ti-3\%C$.

4.2. Двухфазный твердый сплав $Ti-\beta\%Al$

Полное заполнение всех возможных пустот в кластерной решеточной структуре титана произойдет, когда алюминия в качестве наполнителя будет введено не более 6.44% весового состава. В больших сфероидальных пустотах энергия бинарного взаимодействия с двумя молекулами TiAl составляет 0.056 эВ, а с кластером алюминия — 0.370 эВ для пустоты $4.05R_0$, а для пустоты $3R_0$ — соответственно 0.078 и 0.500 эВ. Для щелевидной пустоты $1.5R_0$ — это только 0.039 эВ. Щелевидная пустота $0.5R_0$ и сфероидальная $0.3092R_0$ пустота остаются свободными как от атомов титана, так и от атомов алюминия. Поэтому двухфазный твердый сплав $Ti-6.44\%Al$ упрочняется только вследствие заполнения больших сфероидальных пустот и щелевидной пустоты $1.5R_0$. Введение в такой сплав легирующих добавок кремния приводит к заполнению щелевидных пустот $0.5R_0$, а добавки углерода будут заполнять все возможные межкластерные пустоты титана. В этой связи тройные твердые сплавы титана типа $Ti-\alpha\%C-\beta\%Al$ являются более перспективными. Соот-

Таблица 4
Значения модуля Юнга (ГПа) для металлокерамики на основе титана

Параметр	Вещество		
	Ti	Ti – 3 % C	Ti – 6.44 % Al
$e = 0.137 \%$	108	144–147	155–172

ношение весовых составов легирующих добавок должно подбираться экспериментально.

4.3. Механические свойства двухфазных сплавов на основе титана

В области упругой деформации модуль Юнга, обусловленный межкластерным взаимодействием, определяется следующим образом [6]:

$$E = \frac{2|\Delta E_{\text{св.рез}}|}{21.21d^3e^2}, \quad (13)$$

где $\Delta E_{\text{св.рез}}$ — изменение энергии взаимодействия при отклонении от равновесного расстояния R_0 на ΔR ; d — межядерное расстояние между частицами внутри кластера и $e = \Delta R/R_0$. Конкретный расчет модуля Юнга для двухфазной металлокерамики на основе титана приведен в табл. 4. Для сравнения в табл. 4 приведено табличное значение модуля Юнга для чистого титана. Значения модуля Юнга с наполнителями углерода и алюминия были получены с учетом полного заполнения межкластерных пустот титана.

Сравнить полученные результаты с экспериментальными данными можно лишь качественно. Так, сплав титана ВТ22, содержащий только 0.1 % углерода, при температуре 293 К обладает модулем Юнга 118 ГПа, а сплав ВТ 22ИТ, в который добавлено 0.25 % С, имеет 128–130 ГПа. Качественное согласие с теоретическим расчетом имеет место.

Сплав титана с алюминием ВТИ1 при температуре 953 К обладает модулем Юнга 123 ГПа. С уменьшением температуры модуль Юнга возрастает и можно приблизиться к теоретическому значению двухфазной системы Ti–6.44%Al.

5. Требования к нанотехнологии получения тройных твердых сплавов титана

Для получения тройных сплавов титана необходимо применять гранульную металлургию. Оптимальное соотношение весового состава Ti–0.35 % C–6.44 % Al. Большие сфероидальные пустоты основного материала объемноцентрированной структуры окружены 6-ю кластерами, а гранецентрированной — 5-ю кластерами. Частица с центральной большой сфероидальной пустотой обладает размером $4.84R_{\text{кл}}$ для ОЦК-структуры и $4.62R_{\text{кл}}$ для ГЦК-структуры. Минимальный размер

частиц сферической формы, для которых будет происходить наиболее быстрое заполнение наполнителем сфероидальных больших пустот соответственно составит $9.3R_{\text{кл}}$ и $8.9R_{\text{кл}}$, т.е. для большинства веществ составляет не более 10 нм. Увеличение размера исходных гранульных частиц более 10 нм приводит к заметному возрастанию времени выдержки исходной смеси разнородных частиц при повышенных температурах. Это обусловлено тем, что диффузия кластеров наполнителя в твердом теле основного материала происходит достаточно медленно.

При полном заполнении больших сфероидальных пустот кластерной решеточной структуры основного материала титана кластерами алюминия и атомами углерода возникнут частицы размером ~ 4 нм в кристаллическом состоянии. Такие частицы должны формировать кристалл в виде отдельного блока. Кристаллические блоки, состоящие из отдельных частиц размером 35 нм, были обнаружены в сплавах Fe-Si-B и Co-Mo-Zr [8].

Температура разогрева размешанного состава должна превышать температуру плавления алюминия, но не превышать температуру плавления титана, т.е. являться средней между этими двумя температурами, а именно ~ 1300 – 1400 К. При давлении ~ 200 МПа производится тройной температурный удар с температурой разогрева 1100 К. Экспериментально установлено, что охлаждение должно длиться до одного часа в воздушной атмосфере. При таком способе разогрева и охлаждения приповерхностные слои будут насыщаться атомами кислорода и азота и заполнять малоразмерные межкластерные пустоты в титане с каталитическим образованием молекул TiO и TiN. Это приведет к заметному улучшению механических свойств такого конструкционного металлокерамического материала, т.к. в приповерхностных слоях будут заполнены все щелевидные и малоразмерные сфероидальные пустоты.

6. Выводы

Взаимодействие атомов ближайшего окружения приводит к образованию кластерных структур в виде макромолекул размером не более 1 нм. Межкластерное взаимодействие формирует кластерную решеточную структуру с образованием межкластерных пустот сферической и щелевидной формы. Когда такие пустоты заполняются частицами другого вещества, то образуются более крупные композиционные кластеры кристаллической структуры размером до 10 нм. Взаимодействие композиционных кластеров друг с другом обуславливает возникновение кристаллов блочного типа. Такая модель позволила установить оптимальный процентный состав композиционного сплава и сформулировать требования к технологии получения металлокерамики на основе титана.

Литература

1. *Петров Ю.И.* Кластеры и малые частицы. – М.: Наука, 1983. – 368 с.
2. *Фролов И.А.* Физико-химические основы кластерной динамики // Кластерная динамика и физические основы прочности. – Горький: Изд. ГПИ им. М. Горького, 1983. – С. 3–24.
3. *Суздалев И.П., Суздалев П.И.* Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства // Успехи химии. – 2001. – Т. 70. – Вып. 3. – С. 203–240.
4. *Ватолин Н.А., Пастухов Э.А.* Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. – М.: Наука, 1980. – 189 с.
5. *Еланский Г.Н.* Строение и свойства металлических расплавов. – М.: Металлургия, 1991. – 160 с.
6. *Гречихин Л.И.* Кластерный механизм механических и тепловых свойств монокристаллов и конструкционных материалов // Труды X Международной научно-технической конференции «Машиностроение и техносфера XXI века». – Донецк, 2003. – Т. 1. – С. 185–202.
7. *Бенсон С.* Основы химической кинетики. – М.: Мир, 1962. – 603 с.
8. *Носкова Н.И., Вильданова Н.Ф., Потапов А.П. и др.* Влияние деформации и отжига на структуру и свойства аморфных сплавов // Физика металлов и металловедение. – 1992. – № 2. – С. 101–111.