

## **Нанокерамические конструкционные материалы. Свойства и физика их формирования**

П.А. Витязь, Е.С. Голубцова<sup>1</sup>, Л.И. Гречихин<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> Белорусский национальный технический университет, Минск, 220027, Беларусь

Рассмотрены общие принципы формирования нанокерамических конструкционных материалов. Приведены расчет механических свойств нитридной керамики и экспериментальные данные по плотности и твердости в зависимости от концентрации различных наполнителей для нитридной керамики.

## **Nanoceramic construction materials. Properties and physics of their formation**

P.A. Vityaz, E.S. Golubtsova<sup>1</sup>, and L.I. Grechikhin<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> Belarusian National Technical University NASB, Minsk, 220027, Belarus

The general principles of the formation of nanoceramic construction materials are considered. Mechanical properties of nitride ceramics are calculated and experimental data on density and hardness depending on the concentration of different fillers are given for nitride ceramics.

### **1. Введение**

Нанокерамические конструкционные материалы обладают специфическими физико-механическими свойствами, что позволяет использовать их практически во всех областях народного хозяйства. Широкое применение конструкционной керамики сдерживается рядом ее недостатков, как-то: хрупкость, слабая стойкость к термическим ударам, трудность механической и термической обработки, сложность и несовершенство технологии получения таких материалов, а также сравнительно высокая стоимость керамических изделий. Все перечисленные недостатки обусловлены тем, что слабо изучены: 1) физика формирования наночастиц и нанотехнологий получения конструкционных керамик; 2) связь между внутренним строением конструкционной керамики и ее физико-химическими и эксплуатационными свойствами; 3) связь фазового состава и структуры керамики с ее свойствами.

В настоящее время наиболее перспективными для изготовления конструкционной керамики считаются материалы на основе карбида и нитрида кремния, оксида циркония и алюминия, нитридов титана, бора и алюминия, диборида циркония, а также сиалоны. Физика формирования наночастиц и соответствующая технология получения конструкционной керамики на основе нитрида кремния являются общими для всех других керамических материалов. Поэтому ниже рассмотрим конструкционную керамику только на основе нитрида кремния.

### **2. Образование кластерной решеточной структуры нитрида кремния с различными наполнителями**

Для конденсированного состояния результирующий потенциал бинарного взаимодействия частиц вещества представляется в виде [1]:

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

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;  $\kappa_i$  — 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;  $\theta_i$  — доля ионной связи;  $p_3$  — дипольный электрический момент и  $\alpha_i$  — структурный коэффициент ионного кристалла.

Суммирование в (1) производится в общем случае по ближайшим трем координационным сферам. Таким потенциалом взаимодействия воспользуемся для определения кластерной решеточной структуры. Для нитрида кремния кластерная решеточная структура реализуется довольно сложная. Общий вид такой решеточной структуры в горизонтальной плоскости приведен на рис. 1. Над этой структурой и под ней расположены слои с таким же расположением электрических диполей. Между основными кластерами расположены столбообразные межкластерные пустоты, образуя пористую структуру. Минимальный размер пустоты соответствует диаметру молекулы  $\text{Si}_3\text{N}_4$  (0.67 нм). Энергия связи определяется только диполь-дипольным взаимодей-

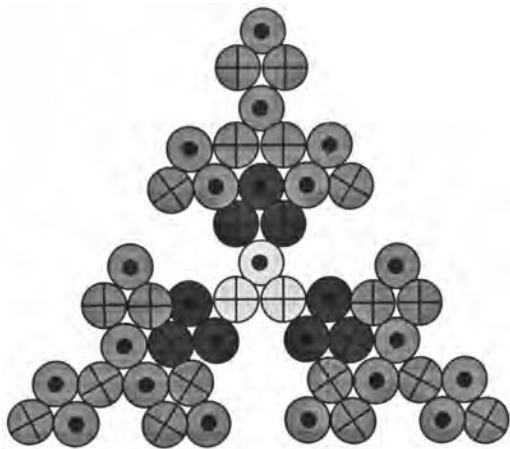


Рис. 1. Общий вид кластерной решеточной структуры нитрида кремния

ствием. В горизонтальной плоскости, как это изображено на рис. 1, энергия бинарной связи основных кластеров соответствует 1.4 эВ. Результирующая энергия связи равна 3.2 эВ. В вертикальном направлении электрические диполи обладают потенциальной энергией 0.461 эВ. В итоге результирующая энергия связи равна 5.532 эВ. Получается, что по своим энергетическим характеристикам нитрид кремния  $\beta$ -модификации не уступает металлам.

Кластерная решеточная структура молекул  $\text{MoSi}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$  представляет собой простую кубическую структуру ионного кристалла.

Результирующая энергия связи кластерной решеточной структуры молекул  $\text{MoSi}_2$  с учетом расталкивания со второй координационной сферой равна 1.136 эВ. Аналогично для молекулярных структур  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{Y}_2\text{O}_3$  соответственно имеем 1.344 и 0.611 эВ. Кластерная решеточная структура молекул  $\text{MoSi}_2$  эффективно должна распадаться при температуре 1923 °С, а  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{Y}_2\text{O}_3$  — при температурах 2325 и 908 °С. Простая кубическая структура, свойственная ионным кристаллам, также является довольно рыхлой. Каждый кластер окружен четырьмя столбообразными пустотами, размеры которых в диаметре составляют  $(\sqrt{2}-1)d_{\text{кл}}$ , где  $d_{\text{кл}}$  — диаметр основного кластера.

Так как кластерная решеточная структура нитрида кремния представляет собой довольно рыхлую систему вследствие наличия большого количества пустот, то она обладает слабыми механическими свойствами. При внешних механических нагрузках возникают винтовые сдвиговые деформации, которые в конечном итоге могут вызвать параллельное расположение электрических дипольных моментов. Это приведет к взрывному механизму распада такой решеточной структуры. Чтобы этого не происходило, необходимо чем-то заполнить межкластерные пустоты. Исходя из вида кластерной решеточной структуры нитрида кремния (рис. 1), наполнители должны обладать большим дипольным электрическим моментом и иметь размер основного кластера, соизмеримый с диаметром столбообразной межкластерной пустоты нитрида кремния. Возникающая дополнительная диполь-дипольная связь в определенном месте столбообразной пустоты упрочняет кластерную решеточную структуру нитрида кремния и вследствие это-

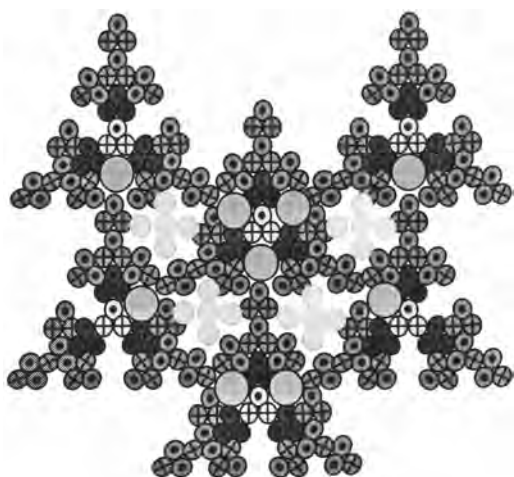


Рис. 2. Фрагмент общего вида кластерной решеточной структуры нитрида кремния

го существенным образом уменьшает винтовые сдвиговые деформации при внешнем нагружении.

В процессе формирования кластерной решеточной структуры образуются пустоты разных размеров. На рис. 2 показан фрагмент малых и больших столбообразных пустот с их плотным заполнением. Малые пустоты могут заполняться только отдельными молекулами, а большие пустоты — отдельными кластерами. Наиболее слабо связаны основные кластеры в решеточной кластерной структуре  $Y_2O_3$ . Эти кластеры заполняют возникающие большие пустоты в решеточной структуре нитрида кремния и формируют плотную упаковку. По своим размерам основные кластеры  $MoSi_2$  также способны практически полностью заполнять столбообразные пустоты нитрида кремния больших размеров. Однако этого не происходит в силу того, что эти молекулы, обладая меньшим дипольным электрическим моментом, будут из больших пустот просто выдавливаться кластерами  $Al_2O_3$  и в основном кластерами  $Y_2O_3$ , так как они обладают наибольшим электрическим моментом. Кластерная решеточная структура  $Al_2O_3$  разрушается при сравнительно высоких температурах. Поэтому крупные частицы глинозема могут заполнять только такие пустоты, которые возникают вследствие наличия дефектов в общей кластерной структуре нитрида кремния. Поэтому в весовом составе исходных продуктов нитридной керамики используется только 1.5 % глинозема. Кластерная решеточная структура  $Al_2O_3$  заметно распадается при достаточно высоких температурах и может заполнять своими основными кластерами большие столбообразные пустоты в нитриде кремния. Исследования, описанные в работе [2], подтверждают этот вывод следующими данными. Растворимость  $Al_2O_3$  в  $Si_3N_4$  при температуре 1750 °C составляет 67 мол. %, а при температуре 1850 °C — уже 78 мол. %.

Полученные значения растворимости хорошо коррелируют с температурой эффективного распада кластерной решеточной структуры  $Al_2O_3$ , которая составляет 2325 °C.

Исходя из общей кластерной решеточной структуры нитрида кремния (рис. 1) получаем, что для полного заполнения возникающих столбообразных пустот большого размера необходимо в исходный состав нитридной керамики вводить  $Y_2O_3$  по весу 5.45 %. Экспериментально определено, что  $Y_2O_3$  в общем весовом составе нитридной керамики должен составлять примерно 5 % [3]. Теоретически рассчитанная величина весового состава  $Y_2O_3$  в нитридной керамике отличается от экспериментально подобранного значения на 0.45 %. Это свидетельствует о том, что кластерная решеточная структура нитрида кремния, изображенная на рис. 2, является реальной.

Исходя из структуры основного кластера  $MoSi_2$  можно заключить, что  $MoSi_2$  будет заполнять малые межкластерные столбообразные пустоты молекулами с последовательным расположением дипольных электрических моментов. Молекулы с антипараллельным расположением дипольных электрических моментов в кластере вследствие сдвиговой деформации будут формировать новое последовательное расположение дипольных электрических моментов и заполнять рядом стоящие столбообразные пустоты малого размера с противоположным расположением электрических диполей. Таким образом, на каждую столбообразную структуру, заполненную  $MoSi_2$ , с определенным направлением дипольного электрического момента, приходится две столбообразные пустоты, которые заполнены с противоположным расположением электрических диполей.

Взаимодействие электрических диполей  $MoSi_2$  малых столбообразных пустот дополнительно упрочняет кластерную решеточную структуру нитрида кремния. Дополнительная энергия сцепления молекул в кластерной решеточной структуре нитрида кремния составляет ~0.088 эВ на каждый основной кластер. В этом случае результирующая энергия связи молекул в основном кластере нитрида кремния имеет значение ~2.86 эВ.

Каждый основной кластер решеточной структуры нитрида кремния окружен тремя малыми столбообразными пустотами. Если рассматривать плотную упаковку решеточной структуры нитрида кремния несжимаемыми сферическими частицами  $MoSi_2$ , то с учетом разных размеров и соответственно масс молекул  $MoSi_2$  и  $Si_3N_4$  необходимо вводить в весовом составе ~70 %  $MoSi_2$ . При этом нет необходимости создавать высокую температуру. Чтобы шло полное заполнение малых столбообразных пустот молекулами  $MoSi_2$ , можно использовать последовательно сравнительно слабые тепловые удары, которые выполняют роль колеблющегося «сита».

При сравнительно высоких температурах происходит каталитический распад молекул  $\text{MoSi}_2$  на  $\text{MoSi}$  и  $\text{Si}$ . Атом  $\text{Si}$ , взаимодействуя с молекулой  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , приводит к ее распаду, и в результате образуется четыре дипольные молекулы  $\text{SiN}$  и одна дипольная молекула  $\text{MoSi}$ , которые формируют новое состояние в виде ионного кристалла, а это — типичный диэлектрик.

### 3. Механические свойства нитридной керамики

Для конденсированного состояния результирующая энергия взаимодействия частиц вещества определяется формулой (1), а вблизи равновесного расстояния  $R_0$  результирующая энергия взаимодействия представляется в более простом виде:

$$E_{\text{св.рез}} = \begin{cases} \beta_1 |r - R_0|^2 & \text{при } 0 \leq r \leq R_0 + \Delta R_{0,1}, \\ \beta_2 |r - R_0|^2 & \text{при } R_0 + \Delta R_{0,1} \leq r \leq R_0 + \Delta R_{0,2}. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $\Delta R_{0,1}$  и  $\Delta R_{0,2}$  — соответственно расстояния между частицами вещества, до которых реализуется квадратичная зависимость потенциала взаимодействия при коэффициенте пропорциональности  $\beta_1$  и затем  $\beta_2$ . Причем  $\beta_1 > \beta_2$ . При воздействии внешнего давления в твердом теле возникают внутренние напряжения. Внутренние напряжения полностью компенсируют внешнее давление. Внутреннее напряжение возникает вследствие смещения атомов (молекул) от своего равновесного расстояния. Зная потенциал бинарного взаимодействия, легко определить возникающее внутреннее напряжение, а именно:

$$\mathbf{P} = \frac{\text{grad}U(r)}{S}, \quad (3)$$

где  $U(r)$  — потенциал взаимодействия;  $S$  — площадь частицы, которая участвует во взаимодействии.

В соответствии с законом Гука упругая деформация твердого тела и приложенное давление связаны линейной зависимостью, т.е.

$$P = Ee, \quad (4)$$

где  $e$  — есть отношение изменения длины образца к его длине;  $E$  — модуль Юнга.

Если равенство (4) выразить через внутренние параметры кристаллической решетки, то оно примет вид:

$$\frac{|U(r) - U(R_0)|}{|r - R_0|S} = E \frac{|r - R_0|}{R_0}. \quad (5)$$

Здесь  $U(R_0) = 2E_{\text{св.рез}}$  — результирующая энергия связи, приходящаяся на две частицы внутри твердого тела, каждая из которых определяется по (1).

Межкластерное взаимодействие в основном обуславливает механические свойства твердого тела. В случае алюминия при нормальных условиях площадь кластера определяется размерами основного кластера. Тогда  $S = 7.07d_0^2/4$  ( $d_0$  — расстояние между атомами внутри

основного кластера), а расстояние между кластерами составит:  $R_0 = 3d_0$ .

Полагаем, что для нитридной керамики в области деформаций  $0 \leq e \leq 0.05$  реализуется квадратичная зависимость потенциала взаимодействия от расстояния между кластерами, тогда в этих пределах деформаций нитридная керамика должна обладать обратимыми свойствами.

Модуль Юнга, обусловленный межкластерным взаимодействием, связан с внутренними параметрами нанокластерной решетки следующим образом:

$$E = \frac{2|\Delta E_{\text{св.рез}}|}{21.21d_0^3e^2}. \quad (6)$$

Выражение (6) определяет модуль Юнга через микроразмеры кристаллического твердого тела. Выполненный расчет модуля Юнга для атомов основного кластера приведен в табл. 1 для  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций нитрида кремния. Для  $\beta$ -модификации приведены данные в зависимости от вида расположения кластеров в горизонтальной ( $\beta_{\parallel}$ ) и вертикальной ( $\beta_{\perp}$ ) плоскостях по отношению к приложенному давлению.

Для  $\alpha$ -модификации модуль Юнга меньше, чем для  $\beta$ -модификации. Введение наполнителя в виде  $\text{MoSi}_2$  заметно увеличивает значение модуля Юнга для  $\alpha$ -модификации и незначительно для  $\beta$ -модификации. Для нитрида кремния без наполнителей модуль Юнга составляет по данным работ [4, 5] 310 ГПа. Для силицида молибдена в работе [6] приведено значение 271.06 ГПа, тогда как в работе [5] — 440 ГПа. Измеренное значение модуля Юнга для нитридной керамики с наполнителем  $\text{MoSi}_2$  30 и 40 % составило соответственно 330 и 340 ГПа [5]. При каких деформациях были выполнены измерения модуля Юнга во всех работах, не сказано. В работе [5] указана только общая погрешность измерения, которая составила  $\sim 1\%$ , а какое при этом было осуществлено удлинение под действием заданной нагрузки, не ясно. Поэтому точного сравнения с экспериментом осуществить не возможно, но измеренные значения модуля Юнга находятся в пределах величин, полученных в теоретических расчетах.

Таблица 1

Значения модуля Юнга (ГПа) для нитридной керамики  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций без наполнителя и с наполнителем

% деформации	Нитридная керамика					
	Без наполнителя			С наполнителем		
	$\alpha$	$\beta_{\parallel}$	$\beta_{\perp}$	$\alpha$	$\beta_{\parallel}$	$\beta_{\perp}$
0.1	182	224	345	395	245	366
0.5	177	218	336	384	239	356
1.0	171	210	324	371	230	344
5.0	131	161	249	285	177	264

Таблица 2

Зависимость плотности ( $\text{кг/м}^3$ ) и микротвердости (МПа) различных образцов нитридной керамики от размера частиц исходных продуктов и концентрации  $\text{MoSi}_2$  в нитриде кремния

Параметры	Размер частиц 0.483 мкм			Размер частиц 0.851 мкм		
	20 % $\text{MoSi}_2$	40 % $\text{MoSi}_2$	60 % $\text{MoSi}_2$	20 % $\text{MoSi}_2$	40 % $\text{MoSi}_2$	60 % $\text{MoSi}_2$
Плотность	$3.76 \pm 0.04$	$4.01 \pm 0.04$	$4.15 \pm 0.04$	$3.44 \pm 0.04$	$3.98 \pm 0.10$	$3.99 \pm 0.09$
Твердость HV 10	1431	1487	1514	1450	1300	1422

По абсолютному значению модуль Юнга для нитридной керамики с наполнителем в  $\beta$ -модификации соответствует углеродистой стали (210 ГПа) в одном из направлений, а при растяжении, когда диполи расположены вдоль приложенной нагрузки в 1.5 раза больше. Поэтому нитридная керамика с наполнителем как конструкционный материал может работать при значительных механических и тепловых нагрузках.

#### 4. Экспериментальные исследования нитридной керамики

Экспериментальная проверка была осуществлена в двух направлениях [7, 8]: 1) проводились измерения плотности образцов в зависимости от процентного содержания  $\text{MoSi}_2$  в нитриде кремния и среднего размера используемого порошка исходных продуктов; 2) исследовалось изменение твердости образцов в зависимости от процентного содержания  $\text{MoSi}_2$  в нитриде кремния и среднего размера используемого порошка исходных продуктов.

Для изучения поведения рассматриваемой смеси проводились dilatометрические исследования спрессованных образцов, которые имитировали процесс спекания данного материала. Стремительное изменение длины образца, связанное с его усадкой и уплотнением, начинается около  $1400^\circ\text{C}$ , что свидетельствует об  $\alpha \rightarrow \beta$ -превращении  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , а начиная с  $1600^\circ\text{C}$  этот процесс замедляется и завершается при  $1850^\circ\text{C}$ .

При малых размерах исходных продуктов происходит практически полное заполнение малых пустот решеточной кластерной структуры нитрида кремния. При больших размерах исходных продуктов спекания проникновение молекул  $\text{MoSi}_2$  внутрь столбчатых пустот малого размера затруднено и растворимость определяется не заполнением пустот, а внедрением основных кластеров в места спайности решеточных кластерных структур нитрида кремния. В результате при спекании керамики из порошков с большим размером исходных продуктов плотность образцов резко падает и возрастает дисперсия ошибок измерения, что подтверждается полученными экспериментальными данными.

Аналогичная ситуация возникает и при измерениях твердости образцов (см. табл. 2).

Рыхлая структура исследуемых образцов, полученных из порошков с большим размером исходных частиц,

приводит к падению твердости и возникает заметный разброс твердости в зависимости от процента растворимости  $\text{MoSi}_2$  в нитриде кремния. Важно было исследовать зависимость твердости от периодического нагрева и охлаждения образцов. Нагрев производился до температур  $500, 600, 700$  и  $1200^\circ\text{C}$  5 раз при выдержке 5 минут (термоудар). На рис. 3 показана зависимость твердости от процентного содержания  $\text{MoSi}_2$  при различных условиях нагрева. При температуре разогрева  $1200^\circ\text{C}$  образуется монолитный кристалл, а для такого состояния вещества твердость должна быть самая высокая, что и подтверждается опытом. В процессе такого превращения при более низких температурах образуются небольшие локальные кристаллы ионного типа, что приводит к резким изменениям механических свойств рассматриваемой керамики. До температуры  $500^\circ\text{C}$  подобный фазовый переход несущественен, но этого достаточно для более равномерного уплотнения нитрида кремния молекулами  $\text{MoSi}_2$ , что должно приводить к увеличению твердости нитридной керамики в соответствии с разработанной моделью формирования нитридной керамики предложенными молекулярными и кластерными структурами.

В соответствии с разработанной моделью плотность спеченных образцов должна возрастать с увеличением

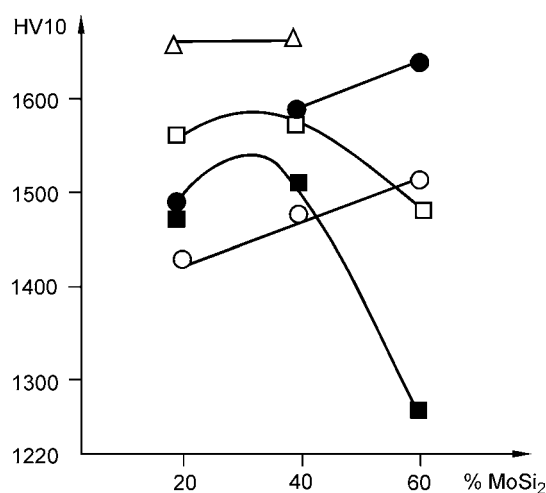


Рис. 3. Зависимость твердости от процентного содержания  $\text{MoSi}_2$  при нормальных условиях (O); после термоудара  $500^\circ\text{C}$  5 раз по 5 минут (●); после термоудара  $600^\circ\text{C}$  5 раз по 5 минут (□); после термоудара  $700^\circ\text{C}$  5 раз по 5 минут (■); после термоудара  $1200^\circ\text{C}$  5 раз по 5 минут (Δ)

содержания  $\text{MoSi}_2$  и падать с ростом среднего размера частиц порошка, используемых продуктов спекания нитридной керамики. Результаты измерения плотности образцов приведены в табл. 2.

Из табл. 2 следует, что при малых размерах исходных продуктов происходит практически полное заполнение малых пустот решеточной кластерной структуры нитрида кремния. При больших размерах частиц исходных продуктов спекания проникновение молекул  $\text{MoSi}_2$  внутрь столбообразных пустот малого размера затруднено и растворимость определяется не заполнением пустот, а внедрением основных кластеров в места спайности отдельных кристаллов. После спекания образца при температуре 1850 °С происходила структурная перестройка молекул нитрида кремния, т.е.  $\alpha$ -модификация переходила в  $\beta$ -модификацию. Решеточная структура образует кристаллическую решеточную структуру, в которой по мере увеличения процентного содержания  $\text{MoSi}_2$  резко уменьшается площадь с микродеформированным состоянием. Этот результат подтверждает рассмотренную модель нитридной керамики, так как возникает заметное увеличение диполь-дипольного взаимодействия между молекулами  $\text{MoSi}_2$  внутри столбообразных малых пустот в решеточной структуре нитрида кремния.

Для структурных образований молекул  $\text{MoSi}_2$  площадь, занимаемая деформированным состоянием, соизмерима с площадью недеформируемого состояния. Для решеточной кластерной структуры нитрида кремния деформированное состояние не является существенным по сравнению с недеформированным состоянием. Это важно для того, чтобы не нарушать исходную структуру нитрида кремния при заполнении больших и малых столбообразных пустот. Полученный результат полностью соответствует структуре, изображенной на рис. 1. По мере заполнения столбообразных пустот молекулами  $\text{MoSi}_2$  диполь-дипольное взаимодействие устанавливает строгую симметрию в расположении молекул  $\text{MoSi}_2$  внутри этих пустот.

Примененная двухчастичная квантово-механическая модель позволила установить механизм образования металлических конструкционных материалов. Кластерная структура последовательно образуется в следующем порядке. Вначале формируются сложные молекулярные структуры. Затем молекулы, взаимодействуя друг с другом, объединяются в кластеры. И только взаимодействие кластерных структур определяет энергетические характеристики конструкционной нанокерамики на мезо- и макроуровне. Керамика на основе нитрида кремния представляет собой наноразмерную пористую структуру со столбообразными пустотами малого и большого размера, заполненными разнородными кластерами из других соединений. Столбообразные пустоты большого размера заполняются кластерами  $\text{Y}_2\text{O}_3$ , а столбообраз-

ные пустоты малого размера — молекулами  $\text{MoSi}_2$ . Пустоты, образующиеся вследствие разного рода дислокаций, заполняются кластерами молекул  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . При высоких температурах 1200 °С и выше система  $\text{Si}_3\text{N}_4 + 60\% \text{MoSi}_2 + 5\% \text{Y}_2\text{O}_3 + 1.5\% \text{Al}_2\text{O}_3$  вследствие протекания каталитических реакций распада молекул  $\text{MoSi}_2$  и образования дипольных молекулы  $\text{SiN}$  трансформируется в ионный кристалл, который является хорошим диэлектриком. Выполненные экспериментальные исследования плотности нитридной керамики, ее твердости и структуры позволили убедиться не только в правильности разработанной модели формирования нитридной нанокерамики, но и, что очень важно, четко сформулировать требования к нанотехнологии получения такой керамики.

## 5. Выводы

Таким образом, проведенный теоретический расчет энергий связи частиц в кластерных образованиях с учетом всех возможных типов взаимодействий бинарного типа позволил установить характер формирования наночастиц в нитридной керамике. Механические свойства такой керамики определяются межнаночастичным взаимодействием. На этой основе проведен расчет модуля Юнга для нитридной керамики  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификации. Величина модуля Юнга в  $\beta$ -модификации значительно превосходит это значение в  $\alpha$ -модификации и уменьшается с ростом величины деформации. Экспериментальные исследования плотности и твердости подтверждают полученный теоретический расчет модуля Юнга при различных модификациях нитрида кремния.

## Литература

1. Витязь П.А., Голубцова Е.С., Гречихин Л.И. Механизм образования нанокерамики на основе нитрида кремния. // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-тэхнічных навук. – 2004. – № 2. – С. 9–15.
2. Андриевский Р.А., Спивак И.И. Нитрид кремния и материалы на его основе. – М.: Металлургия, 1984. – 135 с.
3. Витязь П.А., Голубцова Е.С., Каледин Б.А., Ритцхаупт-Кляйссл Х.-И. Структура и свойства конструкционной керамики на основе силанов. – Минск: УП «Технопринт», 2002. – 225 с.
4. Morrel R. Handbook of Properties of Technical and Engineering Ceramics. – London: Her Majesty's Stationary off, 1985. – Vol. 1. – 348 p.
5. Guicciardi S., Bellosi A. Structure and properties of  $\text{Si}_3\text{N}_4$ – $\text{MoSi}_2$  composites // J. Ceramic Processing Research. – 2002. – V. 3. – No. 3. – P. 87–95.
6. Самсонов Г.В., Дворина Л.А., Рудь Б.М. Силициды. – М.: Металлургия, 1979. – 272 с.
7. Гречихин Л.И., Голубцова Е.С. Кластерная модель конструкционных керамик // Научные труды VI Международного симпозиума «Современные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева, 20–24 октября 2003, г. Старая Русса: в 2 т. / Под ред. В.Г. Малинина. – Великий Новгород: НовГУ им. Я. Мудрого, 2003. – Т. 2. – С. 120–124.
8. Харди Г.К., Хилл Т.Дж. Процесс выделения / Успехи физики металлов. – Т. 2. – М.: ГНТИ лит. по черной и цветной металлургии, 1958. – С. 285–461.