

# ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

---

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК 5)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ  
МЕЗАХИМИИ В ПРОПЕДЕВТИКЕ  
МЕТАХИМИИ



Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

**Физико-химическая механика зернистой среды как функция ансамблей мезоструктуры на примере прочности нитридной керамики**

*Кутолин С.А.*

*профессор, доктор химических наук,*

*академик МАН ЦНЗ и РАТ.*

*Новосибирск, Россия*

РЕФЕРАТ: Иллюстрируется возможность расчёта макроскопических свойств нитридной керамики в зависимости от состава и способов её синтеза как функции квантово – флуктуационных ансамблей мезоструктуры и электронного строения вещества в рамках моделей КЛОП и КРЭП.

*Введение*

Нитридная керамика изготавливалась из нитрида кремния, получаемого из отходов производства карбида кремния по "нитридной" технологии, так как в последнее время возрос интерес к производству теплонапряженных конструкций из нитридов, в частности из нитрида кремния. Отсутствие пластической деформации, низкая ударная вязкость, сравнительно высокие критические коэффициенты напряжений (аналог многоциклового усталости для сталей) требуют казались бы разработки новых принципов для конструирования изделий, отличных от конструирования изделий из сталей [Kutolin S.A., Pisichenko G.M. et al., 1996].

В области теории прочности керамики имеет место парадоксальная ситуация: и статистические, и модельные представления теории прочности лишь отчасти описывают явления, определяющие прочностные характеристики материалов во всем интервале стандартных условий и высоких температур и давлений. Положение хотя и изменяется к лучшему, но не открывает сути физико-химических явлений, протекающих в хрупко-пластическом состоянии зернистой среды, но может быть переоценено приложением к данной ситуации

принципа минимальных изменений Даламбера [Морс Ф.М., Фешбах Г., 1958].

*Физико – химическая механика зернистой среды, ансамбли мезоструктуры и модели электронного строения КЛОП и КРЭП*

Принцип минимальных изменений Даламбера весьма полезен при моделировании экспериментально наблюдаемой характеристики прочности хрупко пластического материала ( $Y_{\varepsilon}$ ), когда в компьютерном эксперименте можно получить стационарный теоретический закон, описывающий прочностные характеристики величин ( $Y_T$ ), так что разница ( $Y_{\varepsilon}-Y_T$ ) есть величина случайная. Тогда, если  $Y_T$  определяется электронным строением и составом керамики, то-есть физико-химическим строением материала, то разница ( $Y_{\varepsilon}-Y_T$ ) есть функция распределения, связанная с технологией и механизмом физико-химических явлений, протекающих в хрупко - пластическом состоянии зернистой среды.

Если обозначить такие смещения свойств керамики ( $\Delta$ ) в форме вектора смещения ( $\varepsilon$ ) с проекциями ( $U_{\alpha}$ ,  $U_{\beta}$ ,  $U_{\gamma}$ ), то использование таких криволинейных координат в теории упругости, вообще говоря, позволяет записать тензорное интегродифференциальное уравнение для величин изменения искомого свойства ( $\Delta^2_{\alpha\beta\gamma}$ ), если имеет место соотношение ( $\Delta=Y_{\varepsilon}-Y_T$ ) в виде:

$$Y^i_{\alpha\beta\gamma}(\varepsilon) - Y^i_{\alpha\beta\gamma}(T) = R^{\delta}_{\alpha\beta\gamma} Y^i_{\delta} = \Delta^i_{\alpha\beta\gamma}, \quad (1)$$

где(R)-тензор Римана Кристоффеля в форме принципа минимальных изменений, аналогичных принципу Даламбера:

$$\int R^{\delta}_{\alpha\beta\gamma} Y^i_{\delta} dU_{\alpha} dU_{\beta} dU_{\gamma} = \int \Delta^i_{\alpha\beta\gamma} dU_{\alpha} dU_{\beta} dU_{\gamma} = 0, \quad (2)$$

где индекс  $i=1,2,3$  в ( $\tau_i$ )означает отнесение изменения искомого свойства:

- 1)к принципу минимальных изменений в конструкции;
- 2)к принципу соответствия тепловых деформаций керамического элемента его свободному расширению;

3)к принципу тепловой однородности керамического элемента.

Можно утверждать, что отыскание стационарной ( $Y_T$ ) динамической модели ( $Y_{cp} \cdot E = \Delta$ ) описания искомого свойства теплонапряженной керамики зернистой среды ( $Y_T$ ) позволяет моделировать это свойство в форме соотношения:

$$Y_{\Delta} = Y_T + Y_{cp} \cdot E \quad (3)$$

И тем самым такая сложная задача сводится фактически к расчету на компьютере энергии основного состояния валентных электронов квазиатомов нитрида кремния и легирующих элементов заданного ряда в ансамбле мезоструктуры по известному в методе "КРЭП" уравнению:

$$E(k) = b_0 p_0(k) + b_1 p_1(k) + b_2 p_2(k) \quad (4)$$

где  $E(k)$ -величина квазиимпульса,  $(b_1, b_2, b_3)$  коэффициенты Чебышева полиномов Чебышева, а  $(s, p_0, p_1, d_0, d_1, d_2)$  - электронные уровни подрешеток Si, N и легирующих  $Si_3N_4$  элементов. Искомое же теоретическое свойство зернистой керамики описывается многофакторной регрессией вида:

$$Y_T = \sum a_n \Gamma_n + B, \quad (5)$$

где  $(Y_{\Delta})$  - наблюдаемое в эксперименте физико-химическое или механическое свойство керамики;  $(\Gamma_n = C_n X_i^n)$  - произведение концентрации n-катиона, аниона или легирующего элемента, а  $(X_i^n)$ -i-значения коэффициента Чебышева для n-легирующего компонента,  $B = const$ .

Методом модельно статистического прогноза отыскивается далее на компьютере теоретические уравнения, позволяющие предсказывать с ошибкой не более 10-12% относительных величины открытой и закрытой пористости керамики, ударной вязкости, среднего предела прочности при статическом изгибе с температурой и другие характеристики

напряженной керамики в зависимости от технологии изготовления, оценивая функции распределения ансамблей мезоструктуры (среднее, дисперсия, асимметрия, эксцесс) и величины критериев значимости (например, Бернштейна, Ястремского и т.п.).

*Результаты расчёта прочности нитридной керамики как функции электронного строения ансамблей мезоструктуры физико – химического состава вещества*

Из уравнения (5), где  $\Gamma_n = C_n X_i^n$  – произведение концентрации (С) n-катиона, аниона нитрида или легирующего компонента (табл.1) и  $X_i^n$  – i-того значения коэффициента Чебышева для n-легирующего компонента; В – постоянный член регрессии. А затем методом модельно-статистического прогноза на основании экспериментальных табличных данных на ЭВМ отыскивались зависимости типа (6). Например, для открытой пористости (ПО) такая зависимость имеет вид:

$$ПО = 3,03S^1(N) + 2963,4 S^3 (Mg) - 164,51 P_1^3 (Siобщ) + 93,7 \quad (6)$$

**Таблица 1**

**Пример составов компонентов нитридной керамики**

№№ пп	Химические элементы, %						
	Своб	N	Al	O	Y	Fe	Si
1	–	33,9	1,3	4,4	8,8	0,1	51,6
2	0,1	36,3	1,0	3,7	4,8		54,9
3	0,1	31,8	5,25	7,25	8,00	0,1	47,7
4	-1,0	36,0	2,0	3,23	4,8	0,07	53,9
5	1,2	37,0	1,3	2,16	3,2	0,14	55,4
6	1,2	35,0	3,6	2,33	8,1	0,14	49,7
7	1,2	34,3	1,58	3,8	8,5	0,14	51,5
8	1,2	36,2	1,2	2,30	4,5		54,3
9	1,2	34,6	0,8	2,93	8,5	0,14	52,0
10	1,2	32,4	0,8	2,01	4,8	0,14	48,7
11	1,5	36,4	2,9	0,43	4,8	0,14	52,7

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и включения (б) для квазиатомов необходимых и достаточных компонентов составил в %

	N	Mg	Si общ
а.	43.3	39.8	17.0
б.	35.8	39.0	25.2

а коэффициент корреляции модели (К.К.М.) – 90,7%.

Результаты сопоставления  $Y_{э}$  с расчетными величинами  $Y_{т}$  приведены для ПО в табл.2

Тем самым открытая пористость (ПО) определяется не всем составом ансамблей мезоструктуры вещества, а только состоянием s-уровней азота, магния и р - состояниями мезаструктуры связанного кремния при соответствующих значениях коэффициентов Чебышева, 1, 3 – инвариантного и квадратичного распределения электронных полос. Откуда полученное правило свидетельствует о селективной природе вклада азота, магния и связанного кремния в описании открытой пористости (ПО) получаемой керамики нитрида кремния.

Если для ПО найденное правило (б) характеризует электронное строение ансамбля квазиатомов азота, магния и связанного кремния, которое свидетельствует о хорошем согласии результатов теории и эксперимента, то флуктуационный анализ величин расхождения между теорией и экспериментом позволяет выявить закон флуктуации ансамблей азота, магния и связанного кремния в мезоструктуре вещества.

**Таблица 2**

**Прогноз ПО**

№	$Y_{э}$	$Y_{расч}$	$\Delta$	№	$Y_{э}$	$Y_{расч}$	$\Delta$
1	17.000	19.457	-2.457	2	23.000	18.617	4.383
3	18.000	20.321	-2.321	4	13.000	15.224	-2.224
5	23.000	20.213	2.787	6	21.000	21.678	-0.678
7	21.000	20.102	0.898	8	25.000	24.975	0.025
9	13.000	11.818	1.182	10	2.500	2.500	0.000
11	11.000	13.767	-2.767	12	12.000	15.957	-3.957
13	16.000	14.357	1.643	14	18.000	14.513	3.487

Статистический анализ величины  $\Delta$  (ПО) позволяет утверждать:

Критерий Ястремского. Значимость = 3.000;

Закон распределения – биномиальный;

Параметры закона:

Среднее = 3.500;

Дисперсия = 1.000;

Асимметрия = 1.299;

Экцесс = -3.658

Расхождение между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер. Следовательно, уравнение (6) есть закон для описания открытой пористости нитридной керамики, молучаемой реакционным спеканием. А совместно правило (6) и статистический анализ есть квантово – флуктуационное описание мезаструктуры открытой пористости нитридной керамики для данных технологических режимов.

Для коэффициента термического расширения (КТР) нитридной керамики такое правило, как правило селективное, имеет уже, естественно, другой вид.

Из результатов статистической обработки величин  $\Delta = Y_{\text{э}} - Y_{\text{т}}$  для КТР следует, что величины  $\Delta$  настолько малы ( $T = 293 - 1173^{\circ}\text{K}$ ), что реализуется только стационарная модель вида (7):

$$\text{КТР}10^6 = - 26.83 d_2^{(2)} (\text{Siсв}) - 2.15S^{(2)} (\text{Al}) - 0.07S^{(2)} (\text{Siсв}) - 28.88 P0^{(3)} (\text{Al}) \quad (7)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и включения (б) составил в %

	Si <sub>св</sub>	Al	Si <sub>св</sub>	Al	N
а.	17.3	24.9	26.3	13.3	18.3
б.	21.0	21.5	19.4	19.6	18.5

**Таблица 3**

**Прогноз КТР.10<sup>6</sup>**

№	Уэ	Урасч	Δ	№	Уэ	Урасч	Δ
1	2.680	2.562	0.118	2	2.510	2.755	-0.245
3	3.070	3.029	0.041	4	2.710	2.741	-0.031
5	2.880	2.836	0.044	6	2.770	2.764	0.006
7	2.670	2.670	0.000	8	3.200	3.200	0.000
9	2.810	2.852	-0.042	10	2.970	2.853	0.117
11	2.800	2.818	-0.018	12	2.860	2.809	0.051
13	2.750	2.792	-0.042				

А термостойкость (ТР) оказывается функцией электронного строения и состава квазиатомов общего кремния в окислительном режиме работы керамики, табл. 4.

$$TP = 779.23 P_1^{(2)} (Si_{общ}) + 254.08 P_0^{(1)} + 1843.28 \quad (8)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом включения (б) составил в %

	Si <sub>общ</sub>	0
а.	35.5	64.5
б.	35.5	64.5

**Таблица 4****Прогноз ТР**

№	Yэ	Yрасч	Δ	№	Yэ	Yрасч	Δ
1	968.000	876.960	91.048	2	813.000	962.739	-149.739
3	1138.000	1143.593	-5.593	4	938.000	942.172	-4.172
5	928.000	903.122	34.878	6	973.000	997.445	-24.445
7	1223.000	1130.273	92.727	8	1128.000	1179.364	-51.364
9	1200.000	1196.897	3.103	10	1238.000	1214.430	23.570

Квантово – флуктуационная природа ансамбля мезоструктуры нитридной керамики, отвечающей за термическое расширение материала описывается следующими правилами статистического анализа.

Распределение величин  $\Delta = Y_э - Y_т$  позволяет выявить лимитирующую стадию кинетики взаимодействия общего кремния нитридной керамики с кислородом, определяемую по закону Пуассона:

Критерий Бернштейна. Отклонение от  $I = 0.300$

Закон распределения – Пуассона;

Параметры закона:

Среднее = 3.333

Дисперсия = 4.333

Асимметрия = -0,704;

Экссесс = 2.000

Расхождение между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер. Вероятность ошибочного отклонения гипотезы о выбранном законе распределения = 0.246.

Результаты статистической обработки позволяют утверждать в технологическом плане, что получение реакционно-спекаемой безпористой керамики целесообразно проводить, используя как газовые среды (азот), так и вакуум.

Результаты моделирования ударной вязкости ( $a_{293}$ ) при 293°K, среднего предела прочности при статическом изгибе при T=293°K –  $\sigma_{1673}$  приведены в форме рецептур (9), (10), (11), результаты расчета по ним приведены в таблицах. Как следует из полученных результатов связанный в нитрид и общий кремний, их электронное строение, а также добавки квазиатомов алюминия, бора, иттрия являются необходимыми и достаточными компонентами, описывающими искомые механические свойств:  $a$ ,  $\sigma_{293}$ ,  $\sigma_{1673}$  :

$$a = 5891.23 P_o^{(2)}(N) + 8771.24 P_o^{(2)}(B) - 51.16 E_p(Si_{CB}) - 262.067 \quad (9)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом включения (в) составил в %

	<i>N</i>	<i>B</i>	<i>Si<sub>ce</sub></i>
а.	37.9	56.1	6.0
в.	27.2	28.7	44.1

Распределение величин  $\Delta = Y_3 - Y_T$  описывается геометрическим законом, что свидетельствует об отклонении  $Y_3$  в результате явлений диффузии дефектов в реакционно-спеченном нитриде кремния. Тем самым по аналогии с предыдущими правилами ансамбли мезоструктуры описываются следующими законами.

Критерий Бернштейна. Отклонение от I=0.100;

Закон распределения – геометрический;

**Таблица 5**

**Прогноз а**

№	Yэ	Yрасч	Δ	№	Yэ	Yрасч	Δ
1	2150.000	2041.487	108.513	2	2150.000	2219.495	-69.495
3	2355.000	2404.841	-49.841	4	2250.000	2234.633	15.367
5	2250.000	2249.949	0.051	6	1960.000	2021.912	-61.912
7	2254.000	2197.294	56.706	8	2254.000	2138.202	115.798
9	1872.000	1987.207	-115.207				

**Таблица 6**

**Прогноз  $Y_{293}$**

№	Yэ	Yрасч	Δ	№	Yэ	Yрасч	Δ
1	215.000	206.393	8.607	2	230.000	206.393	23.607
3	225.000	206.393	18.607	4	284.000	206.393	87.607
5	206.000	206.393	-0.393	6	196.000	206.393	-10.393
7	201.000	206.393	-5.393	8	176.000	206.393	-30.393
9	88.200	206.393	-118.193	10	238.000	206.393	31.607
11	193.000	206.393	-13.393	12	196.000	206.393	-10.393
13	441.000	451.884	-10.884	14	519.000	451.884	67.116
15	500.000	479.160	20.840	16	539.000	589.826	-50.826
17	186.000	193.812	-7.812	18	159.000	164.457	-5.457
19	156.000	153.973	2.027	20	147.000	143.489	3.511

Параметры закона :

Среднее = 3.000

Дисперсия = 1.000

Асимметрия = 0.0

Экцесс = 2.000

Расхождение между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер. Вероятность ошибочного отклонения гипотезы о выбранном законе распределения = 0.066

$$\sigma_{293} = 38966 \times d_1^{(3)}(Y) - 35.3 E_p(B) + 206,39 \quad (10)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом включения (в) составил в %

	Y	B
а.	88.6	11.4
в.	88.6	11.4

Критерий Ястремского. Значимость = 3.000

Закон распределения – геометрический;

Параметры закона:

Среднее = 2.857;

Дисперсия = 8.476;

Асимметрия = 0.786;

Эксцесс = 2.152.

Расхождение между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер.

$$\sigma_{1673} = -27.76436 \times S_1(Si_{\text{общ}}) + 69923..25 P_o^{(2)}(Al) - 246/2 \quad (11)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом включения (в) составил в %

	$Si_{\text{общ}}$	$Al$
а.	49.1	50.9
в.	49.1	50.9

**Таблица 7**

**Прогноз  $\gamma_{1673}$**

№	Yэ	Yрасч	Δ	№	Yэ	Yрасч	Δ
1	235.000	246.283	-11.283	2	249.000	240.833	8.167
3	235.000	217.567	17.433	4	195.000	214.801	-19.801
5	255.000	238.636	16.364	6	235.000	209.676	25.324
7	225.000	230.827	-5.827	8	157.000	174.614	-17.614
9	92.000	167.280	-75.280	10	184.200	165.734	18.466
11	282.000	165.246	116.754	12	151.000	164.758	-13.758
13	117.600	163.782	-46.182	14	186.000	207.968	-21.968
15	156.000	173.801	-17.801	16	176.000	161.598	14.402
17	162.000	149.396	12.604				

Из анализа табл.6 и 7 следует, что стационарные модели удовлетворительно передают характер изменения величин  $\sigma_{293} = 88.2$  и  $\sigma_{1673} = 92$  явно выпадают из наблюдаемых закономерностей. Тем более примечательным является тот факт, что стационарная модель справедливо описывает уменьшение прочности на изгиб с температурой, т.е. для опыта 9  $\sigma_{1673} = 167.28$  и  $\sigma_{293} = 206.39$ . Если значения средних пределов прочности на изгиб спеченной нитридной керамики в значительной степени зависят от процессов диффузии кислорода в керамику и от характера химических и диффузионных процессов квазиатомов железа, иттрия, алюминия, то технология реакционного спекания также влияет на механические свойства керамики через функциональное поведение квазиатомов в нитриде, например, иттрия, алюминия, бора, но наряду с этим общее содержание кремния в нитридной керамике оказывает существенное влияние на  $\sigma_{1673}$ , что представляется интересным в плане протекания химического процесса в реакционно-синтезируемом нитриде кремния, где и нитридный и свободный кремний оказывают влияние на конечный результат. Полученные результаты и их сравнение с расчетными данными позволяют убедиться в реальной значимости кватово – флуктуационной природы мезаструктуры вещества, к которым принадлежит и керамика как квазихрупкая среда. Можно показать, что изменение способа получения нитридной керамики не изменяет представления о ней как квазихрупкой среде

*Нитридная керамика, получаемая по технологии горячего прессования*

Средний предел прочности при статическом изгибе,  $T=1673$  (1773)<sup>о</sup> К –  $\sigma_{1673}$  и средний теоретический коэффициент интенсивности напряжений –  $K_{1C}$  описываются следующими уравнениями (12), (13), а результаты расчета по этим уравнениям сопоставлены в табл. 8 и 9.

$$\sigma_{1673} = 19.89 E_p (Si_{связн.}) - 1492237.0 p_i^{(3)}(0) + \\ + 1945/86 s^3 (Si_{своб}) + 216519.06 d_0^{(2)}(Y) - 1566/42$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом (б) составил в %

	$S_{i\text{связн}}$	$O$	$S_{i\text{своб}}$	$Y$
а.	0.3	51.9	0.3	47.5
б.	33.2	16.8	33.2	16.8

**Таблица 8**

**Прогноз  $Y_{1673}$**

№	Yэ	Yрасч	$\Delta$	№	Yэ	Yрасч	$\Delta$
1	884.000	741.789	142.211	2	514.000	395.459	118.541
3	510.000	469.980	40.020	4	774.000	528.289	245.711
5	421.000	486.488	-65.488	6	607.000	438.918	168.082
7	553.000	438.918	114.082	8	299.000	481.527	-182.527
9	450.000	458.016	-8.016	10	482.000	439.770	42.230
11	601.000	506.434	94.566	12	602.000	506.434	95.566
13	323.000	507.535	-184.535	14	343.000	460.203	-117.203
15	344.000	495.484	-151.484	16	207.000	499.848	-292.848
17	327.000	439.770	-112.770	18	414.000	460.121	-46.121
19	251.000	507.535	-256.535	20	327.000	438.781	-111.781
21	492.000	499.848	-7.848	22	466.000	473.211	-7.211
23	503.000	506.637	-3.637	24	390.000	370.547	19.453
25	550.000	479.906	70.094	26	766.000	507.535	258.465
27	406.000	437.160	-31.160	28	536.000	451.230	84.770
29	486.000	396.035	89.965	30	544.000	396.035	147.965
31	575.000	468.352	106.648	32	575.000	434.305	140.695
33	371.000	434.305	-63.305	34	417.000	424.383	-7.383
35	456.000	434.305	21.695	36	508.000	510.199	-2.199
37	444.000	510.199	-66.199	38	397.000	439.367	-42.367
39	456.000	510.199	-54.199	40	501.000	468.352	32.648
41	406.000	443.445	-37.445	42	423.000	468.742	-45.742
43	374.000	476.332	-102.332	44	525.000	477.535	47.465
45	417.000	436.936	-19.926	46	387.000	446.250	-59.250

Критерий Бернштейна. Отклонение от  $I = 0.100$

Закон распределения – геометрический.

Параметры закона:

Среднее = 4.600

Дисперсия = 13.378

Асимметрия = 0.589

Экцесс = -1.709

Расхождения между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер. Вероятность ошибочного отклонения гипотезы о выбранном законе распределения = 0.016.

По существу влияние диффузии кислорода и концентрация квазиатомов иттрия определяет стационарную и динамическую модель, позволяющую точно с вероятностью ошибочного отклонения гипотезы о выбранном законе распределения (= 0.016) описать искомое свойство  $\delta_{1673}$ . Как акцептор кислорода в качестве таковых в нитридной спеченной и горячепрессованной керамике выступают связанный в нитрид кремний и свободный кремний.

$$K_{1c} = -223.57 P_1^{(3)}(Si_{\text{своб}}) - 13.44 S^1(O) - 15.38 \quad (13)$$

Вклад включенных параметров, рассчитанный методом исключения (а) и методом включения (б) составил в %

	$Si_{\text{своб}}$	$O$
а.	40.7	59.3
б.	40.7	59.3

Прогноз  $K_{1c}$ 

№	Yэ	Yт	Δ	№	Yэ	Yт	Δ
1	5.800	6.667	-0.867	2	4.600	6.599	-1.999
3	4.400	4.764	-0.364	4	7.500	6.667	0.833
5	8.000	7.271	0.729	6	7.200	6.553	0.647
7	6.500	6.553	-0.053	8	7.000	8.189	-1.189
9	9.200	6.936	2.264				

Критерий Бернштейна. Отклонение от  $I = 0.300$

Закон распределения – геометрический.

Параметры закона:

Среднее = 3.000

Дисперсия = 4.000

Асимметрия = 0.0

Экссесс = 2.000

Расхождение между эмпирическим и теоретическим распределением носит случайный характер. Вероятность ошибочного отклонения гипотезы о выбранном законе распределения = 0.110.

### **Заключение**

1. Используя представления о квантово – флуктуационной мезаструктуре природы вещества методами модельно-статистического анализа и анализа статистической достоверности, удалось найти и вычислить вклад электронного строения и состава квазиатомов ансамблей, влияющих на физико-химические свойства нитридной керамики, получаемой по различным технологиям.

2. Найдены правила в форме уравнений, позволяющие составлять рецептуру нитридной керамики, а также использовать электронные аналоги – заместители для предсказания искомым физико-химических

(плотность кажущаяся, пористость открытая, средняя линейная усадка, коэффициент термического расширения, термостойкость) и механических (предел прочности при статическом изгибе, ударная вязкость, коэффициент интенсивности напряжений) свойств нитридной керамики.

3. Стационарные модели, описывающие физико-химические и механические свойства нитридной керамики по различной технологии, с высокими коэффициентами корреляции модели (ККМ) позволяют выделить функциональные, избирательные (необходимые и достаточные аргументы для описания искомого свойства как в форме состава нитридного кремния (связанный кремний), так и свободного, а также примесей квазиатомов элементов магний, бор, железо, алюминий, иттрий, вклад подрешетки азота и кислорода в описании искомого свойства. Фактически обнаружено, что не только матрица нитрида, но и добавки селективно влияют на отдельные физико-химические свойства с температурой. При этом наблюдается симбатность в изменении свойств и состава, электронного строения квазиатомов.

4. Динамические модели, описывающие отклонение свойства в форме величин  $\Delta = Y_s + Y_T$  позволяет с заданной степенью безошибочного распознавания получить закон распределения, описывающий отклонение экспериментальной величины  $Y_s$  от величины расчета по стационарной модели  $Y_T$ . Этот результат, получаемый в форме функции распределения, описывает механизм дефектообразования (кинетическая область – закон распределения Пуассона; диффузионный процесс – геометрическое, биномиальное распределение, сводящееся к уравнению типа Фоккера – Планка), свидетельствуя о законе флуктуации ансамблей квазиатомов  $m$  в мезаструктуре зернистой среды.

#### ЛИТЕРАТУРА

Kutolin S.A. & G.M.Pisichenko & A.S.Kapran.1996. Computer models of constructional properties steels . Novosibirsk: Chem. Lab.NCD.

Морс Ф.М.,Фешбах Г.Методы теоретической физики.М.-Л.-ИИЛ,1958.- т.I.-стр.365,781.