

## ПЕРСПЕКТИВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Витязь П. А., Голубцова Е. С., Гречихин Л. И.

ИТ и МО НАНБ, БНТУ г. Минск, Республика Беларусь, [Gretchihin@yandex.ru](mailto:Gretchihin@yandex.ru)

Керамические материалы получают с использованием нанотехнологий, которые разрабатываются чисто экспериментальным путем. Это обусловлено тем, что теоретический аспект полного описания таких технологий не достаточно разработан. В настоящий момент нами практически найдены пути и методы теоретического описания, как строения керамических материалов, так и их механических свойств с использованием кластерных решеточных структур с соответствующими наполнителями, которые получаются на основе применения двухчастичной квантово-механической модели [1].

Механические, тепловые и электрические свойства различных керамик определяются, прежде всего, параметрами основной кластерной решеточной структуры, используемыми наполнителями и технологией их получения. При плотной упаковке межкластерных столбообразных пустот механические свойства определяются потенциалом взаимодействия частиц преимущественно в наполнителях. Деформация частиц наполнителей определяется винтовыми сдвиговыми и линейными изменениями структуры под воздействием кластеров основного материала. Такая сложная деформация обусловлена тем, что наполнитель столбообразных пустот хаотически расположены друг относительно друга. Возникающая деформация выстраивает отдельные молекулы и основные кластеры наполнителей относительно основной кластерной решеточной структуры во вполне определенных плоскостях. Поэтому в начальный момент напряженно-деформация находится в нелинейной области со сложной зависимостью. Прочность керамики определяется межкластерным взаимодействием основного материала.

Тепловые свойства керамик, такие как расширение, теплоемкость, теплопроводность и другие, имеют лучшие показатели по сравнению с металлическими конструкционными материалами. Плотная упаковка частиц в керамических структурах приводит к малому тепловому расширению, большой теплоемкости и слабой теплопроводности. Тепловое расширение, в основном, определяется поведением основной решеточной структуры. Теплоемкость определяется наличием большого количества различных веществ и сложным строением кластерных структур используемых материалов. В соответствии с законом смешения Джоуля–Коппа удельная теплоемкость керамик по сравнению с металлическими конструкционными материалами имеет значительно большее значение.

Теплопроводность веществ определяется скоростью распространения тепла в данном веществе и характером возбуждения колебательных степеней свободы. Так как керамические материалы являются многокомпонентными, то одновременное возбуждение колебательных степеней свободы многих компонент требует большего времени, а это резко уменьшает скорость распространения тепла.

Электрические свойства, такие как диэлектрические, электросопротивление, резонансные свойства и др. определяются тем, что исходные вещества, входящие в керамику, обладают большим дипольным электрическим моментом. Такие материалы являются, как правило, диэлектриками. Уменьшая величину дипольного электрического момента кластеров основного материала путем введения соответствующего наполнителя, можно получить разные значения электросопротивления.

1. Витязь П. А., Голубцова Е. С., Гречихин Л. И. Механизм образования керамики на основе нитрида кремния. // Вестн НАНБ, №2, 2004. — в печ.