

УДК 669.293

Н.А. Кузьмина<sup>1</sup>, И.Л. Светлов<sup>1</sup>, Д.В. Зайцев<sup>1</sup>, А.В. Заводов<sup>1</sup>

**КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТЕЙ  
РАЗДЕЛА «НИОБИЕВАЯ МАТРИЦА–СИЛИЦИДЫ Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>»  
В ЕСТЕСТВЕННЫХ КОМПОЗИТАХ Nb–Si**

DOI: 10.18577/2307-6046-2018-0-12-14-24

*Проведен анализ поверхностей раздела фаз в естественных композитах Nb–Si для трех структурных модификаций Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>. На основании кристаллохимического анализа поверхностей фазового контакта, используя понятие решетки совпадающих узлов, определена величина несоответствия в межатомном расстоянии сопрягающихся плоскостей и сделан вывод о механизмах компенсации решеточного несоответствия, степени деформации кристаллических структур и возможности диффузионных процессов на интерфейсе для композитов Nb–Si с различными модификациями силицида.*

**Ключевые слова:** Nb–Si естественные композиты, жаропрочные сплавы, рентгеноструктурный фазовый анализ, кристаллохимический анализ, решетка совпадающих узлов.

N.A. Kuzmina<sup>1</sup>, I.L. Svetlov<sup>1</sup>, D.V. Zaitsev<sup>1</sup>, A.V. Zavodov<sup>1</sup>

**CRYSTAL CHEMICAL ANALYSIS  
OF INTERFACES «NIOBIC MATRITSA–SILITSIDY Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>»  
IN NATURAL COMPOSITES OF Nb–Si**

*The analysis of the interfaces of the phases in the natural composites of Nb–Si for the three structural modifications Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>. On the basis of crystal-chemical analysis of phase interface surfaces, using the concept of a lattice of matching nodes, the value of the discrepancy in the interatomic distance of mating planes is determined and the conclusion is made about the mechanisms of compensation of lattice mismatch, the degree of deformation of crystal lattices and the possibility of diffusion processes on the interface for Nb–Si composites with different modifications of silicide.*

**Keywords:** Nb–Si natural composites, heat-resistant alloys, x-ray phase analysis, crystal chemical analysis, lattice of matching nodes.

---

<sup>1</sup>Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal State Unitary Enterprise «All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials» State Research Center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

**Введение**

Высокотемпературный естественный композит на основе системы Nb–Si рассматривают в качестве альтернативного жаропрочного материала будущего, который заменит монокристаллические никелевые жаропрочные сплавы при производстве лопаток перспективных ГТД [1–3]. Композит должен обладать низкой плотностью 7,2–7,5 г/см<sup>3</sup>, надежно работать при температуре до 1350°C [4–8]. Жаропрочность таких композитов при высоких температурах определяется свойствами силицидов, образующих армирующую фазу в матрице твердого раствора ниобия (Nb<sub>ТВ,Р</sub>). Строение поверхностей раздела между матрицей и армирующей фазой в естественных композитах

является важным фактором, влияющим на механические свойства материала, так как через поверхность раздела передается механическое воздействие от пластичной матрицы к хрупкому силициду.

Межфазные поверхности представляют собой двумерные дефекты толщиной 0,3–0,10 нм, в пределах которых нарушено упорядоченное расположение атомов, характерное для каждой из фаз [9, 10]. Протяженность и строение границ между матрицей и армирующей фазой в естественных композитах определяет многие механические свойства в широком температурном интервале, такие как прочность, трещиностойкость, температура перехода хрупко-вязкого разрушения. Если, например, в жаропрочных никелевых сплавах когерентная деформация на границах раздела гранцентрированных кубических  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз коррелирует с величиной несоответствия параметров элементарных ячеек и обуславливает механизм твердорастворного упрочнения в никелевых сплавах, то в отличие от никелевых жаропрочных сплавов в композитах на основе системы Nb–Si переход через межфазную границу изменяет не только параметры элементарной ячейки и химический состав, но также и тип кристаллической решетки Браве.

Образование структуры *in situ* композитов происходит при кристаллизации в соответствии с бинарной диаграммой Nb–Si (рис. 1). При температуре 1920°C и содержании кремния в сплаве 18,7% (атомн.) протекает эвтектическая реакция

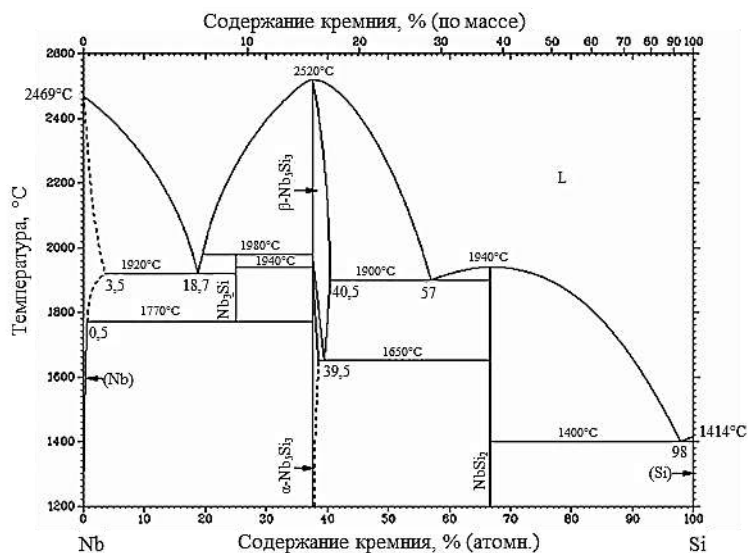
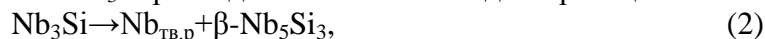
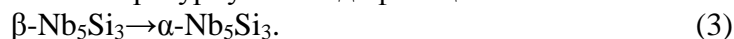


Рис. 1. Диаграмма состояния системы Nb–Si

В дальнейшем структура формируется путем твердофазных превращений – при температуре 1770°C силицид ниобия  $Nb_3Si$  распадается по эвтектоидной реакции



где  $\beta-Nb_5Si_3$  – высокотемпературная модификация силицида, которая в свою очередь при охлаждении превращается в низкотемпературную  $\alpha$ -модификацию



Наряду с  $\alpha-Nb_5Si_3$  и  $\beta-Nb_5Si_3$  модификациями силицидов тетрагональной сингонии существует гексагональная модификация силицида –  $\gamma-Nb_5Si_3$ , стабилизируемая атомами углерода [11]. Структурные характеристики ниобиевой матрицы и полиморфных модификаций силицидов  $Nb_5Si_3$  приведены в таблице.

**Структурные характеристики  
полиморфных модификаций силицидов Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> и ниобиевой матрицы**

Пространственная группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, нм	Структурный тип
Полиморфные модификации силицидов Nb <sub>5</sub> Si <sub>3</sub>		
$\alpha$ , <i>I4/mcm</i> [12]	$a=0,6570$ ; $c=0,11884$	Cr <sub>5</sub> B <sub>3</sub> (тетрагональная)
$\beta$ , <i>I4/mcm</i> [13]	$a=0,10018$ ; $c=0,5072$	Mo <sub>5</sub> Si <sub>3</sub> (тетрагональная)
$\gamma$ , <i>P6<sub>3</sub>/mcm</i> [14]	$a=0,7536$ ; $c=0,5249$	Mn <sub>5</sub> Si <sub>3</sub> (гексагональная)
Ниобиевая матрица		
<i>I m-3 m</i>	$a=0,3300$	ОЦК

В многокомпонентной системе Nb–Si различные легирующие элементы стабилизируют ту или иную модификацию силицидов. Так, гексагональная модификация стабилизируется углеродом, а также элементами IV группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева – Ti и/или Hf [15]. Для стабилизации при комнатной температуре высокотемпературной модификации  $\beta$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> систему легируют Mo [14].

Полиморфизм силицидов Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> обуславливает многообразие ориентационных соотношений (ОС) между фазами и часто является причиной неоднозначных экспериментально определенных ОС в композитах на основе легированной системы Nb–Si [16–18]. Считается, что образование межфазных границ в твердом состоянии происходит в соответствии с принципом минимума энергии, а значит, с наименьшим искажением кристаллических структур фаз на поверхностях контакта фаз.

В настоящее время наиболее часто исследования межфазных поверхностей раздела в естественных композитах Nb–Si проводятся методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения. Однако кристаллографически обусловленное формирование интерфейса *in situ* композитов Nb–Si позволяет изучать поверхности раздела фаз не только методами ПЭМ высокого разрешения, но и методами кристаллохимического моделирования как для объяснения уже имеющихся экспериментальных данных, так и для прогнозирования возможных ОС фаз [19, 20].

Современные методы моделирования строения межфазных границ базируются на постулате о том, что атомы на поверхностях раздела находятся в поле сил, обусловленных действием обоих кристаллов. Часть узлов решеток обеих фаз становятся общими и образуют решетку совпадающих узлов (PCY). Их расположение характеризуется периодичностью и может коррелировать с системой межфазных дислокаций несоответствия [9].

Цель данной статьи – в геометрическом и кристаллохимическом анализе атомной структуры межфазных границ полиморфных модификаций  $\alpha$ -,  $\beta$ - и  $\gamma$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> силицидов ниобия и матрицы твердого раствора ниобия *in situ* композитов системы Nb–Si.

Работа выполнена в рамках реализации комплексной научной проблемы 9.4. «Композиты на основе тугоплавких металлов, упрочненные интерметаллидами» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [21].

**Материалы и методы**

Для моделирования межфазных границ между матрицей ниобия и конкретной полиморфной модификацией силицида ОС выбирали на основе анализа научно-технических литературных данных и результатов собственного эксперимента [16, 17, 22].

В статье [16] исследовано фазовое равновесие  $\alpha$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> и  $\beta$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> силицидов в тройной системе Nb–Mo–Si. После отжига сплавов при 1300–1600°C длительностью 200 ч в объеме  $\alpha$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> и  $\beta$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> силицидов обнаружены дисперсные частицы твердого раствора ниобия, выделившиеся при охлаждении вследствие уменьшения растворимости. Методом просвечивающей электронной микроскопии найдено ОС между силицидами и частицами твердого раствора ниобия:

$$\text{Nb}_{\text{ТВ.Р}}-\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3 [110]_{\text{Nb}} \parallel [110]_{\alpha} (\bar{1}12)_{\text{Nb}} \parallel (1\bar{1}0)_{\alpha}; \quad (4)$$

$$\text{Nb}_{\text{ТВ.Р}}-\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3 [111]_{\text{Nb}} \parallel [121]_{\beta} (\bar{1}01)_{\text{Nb}} \parallel (2\bar{1}0)_{\beta}. \quad (5)$$

Ориентационное соотношение между твердым раствором  $\text{Nb}_{\text{ТВ.Р}}$  и гексагональным силицидом  $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  определено авторами данной статьи [22] (рис. 2) методом ПЭМ:

$$\text{Nb}_{\text{ТВ.Р}}-\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3 [111]_{\text{Nb}} \parallel [001]_{\gamma} (110)_{\text{Nb}} \parallel (10\bar{1}0)_{\gamma}. \quad (6)$$

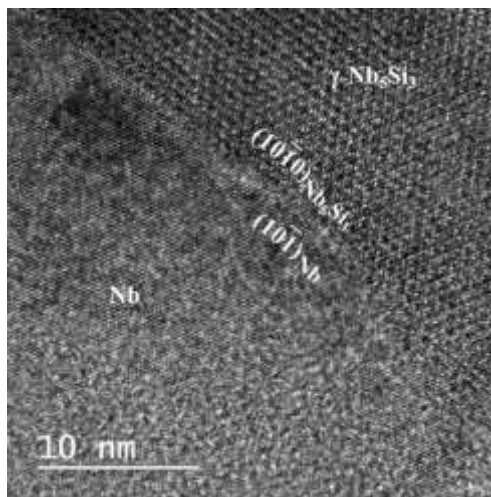


Рис. 2. Граница раздела фаз Nb/ $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$

Ориентационное соотношение (6) совпадает с данными других публикаций [17]. В обоих исследованиях ОС (6) фаз определялось в композитах с направленной структурой.

Для кристаллохимического анализа поверхностей раздела полиморфных модификаций силицида и ниобиевой матрицы построены кластеры «жестких», нерелаксированных структур ОЦК ниобия и соответствующей полиморфной модификации силицида в программе Diamond (рис. 3). Структурные модели построены на данных для бинарных соединений полиморфных модификаций силицидов и чистого ниобия (см. таблицу). Из кластера «вырезаны» плоскости сопряжения, которые затем сориентированы в соответствии с найденным кристаллографическим направлением (4)–(6), исходя из данных эксперимента авторов статьи и опубликованных данных других авторов. Геометрический анализ проводили на основании расчетных межатомных расстояний в «вырезанных» плоскостях контакта фаз.

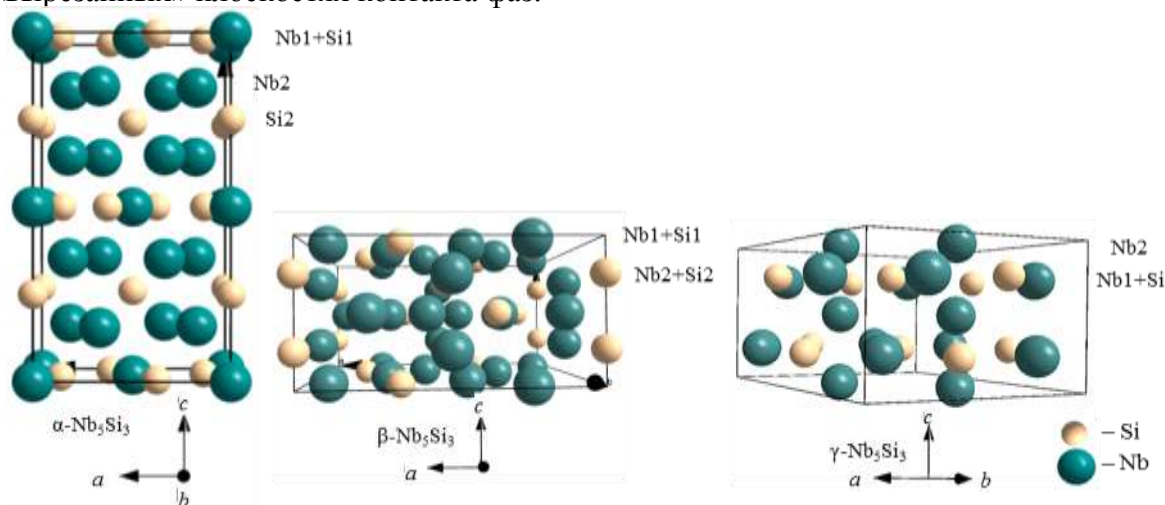


Рис. 3. Модели атомной структуры трех полиморфных модификаций силицида  $\text{Nb}_5\text{Si}_3$  (обозначены неэквивалентные позиции атомов Nb и Si)

Результаты и обсуждение

Присутствие на поверхности раздела фаз атомов ниобия и кремния позволяет характеризовать наличие на интерфейсе как существенно металлической, так и существенно ковалентной типов связей.

*Кристаллохимический и геометрический анализ интерфейса фаз ОЦК Nb и тетрагонального  $\alpha$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> силицида*

На рис. 4 приведена расчетная модель атомной структуры плоскостей контакта (112)<sub>Nb</sub> ниобиевой матрицы и (110)<sub>α</sub> армирующей фазы силицида  $\alpha$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>. При этом в соответствии с ОС (4) атомные ряды в обеих фазах сориентированы так, чтобы соблюдалась параллельность направлений  $[110]_{Nb} \parallel [110]_{\alpha}$ . Атомы Nb и Si в структуре  $\alpha$ -силицида занимают по две неэквивалентные позиции (рис. 3), в плоскости сопряжения представлены атомами только одной структурной позиции: Nb1 и Si2.

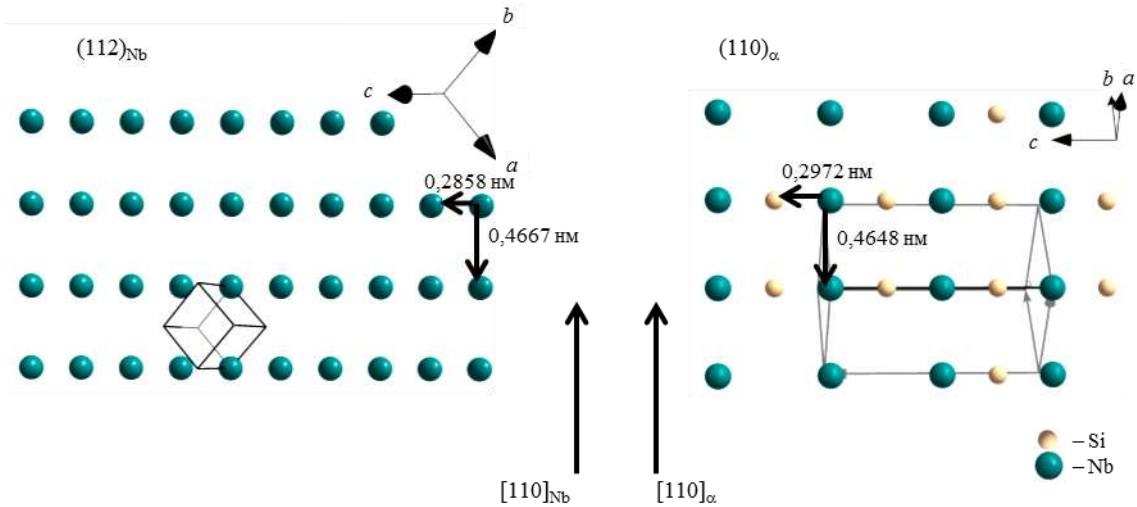


Рис. 4. Модели атомной структуры плоскостей сопряжения (112)<sub>Nb</sub> ниобия и (110)<sub>α</sub> силицида  $\alpha$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> (сетки атомов обеих фаз ориентированы вдоль направлений  $[110]_{Nb} \parallel [110]_{\alpha}$ )

Поскольку половина атомных рядов в (110) плоскости решетки силицида содержит атомы Si, то в плоскости сопряжения предполагается наличие как металлической, так и ковалентной типов связей. Видно (рис. 4), что ряды атомов в обеих фазах расположены под прямым углом, а межатомные расстояния в матрице Nb–Nb<sub>[001]</sub> и в силициде Nb–Si<sub>[001]</sub> в обеих фазах имеют близкие значения. Размерное несоответствие межатомных расстояний равно:

$$F = \frac{2(0,2972 - 0,2858)}{0,2972 + 0,2858} = 0,039,$$

что составляет 3,9% от длины связи Nb–Si или 0,0112 нм. Если расстояние Nb–Si в силициде 0,2972 нм принять за 100%, то число связей в периоде РСУ вдоль данного кристаллографического направления будет  $100:3,9=25,06$ , т. е. через 26 связей Nb–Si произойдет совпадение узлов атомов. Умножая найденное число связей на длину связи  $C_{PCY} = 26 \cdot 0,2972 = 7,7272$  нм, находим период совпадающих узлов в жестких нерелаксированных атомных сетках вдоль направлений  $[001]$  обеих фаз.

Для кристаллографических направлений в матрице Nb–Nb<sub>[011]</sub> и в силициде Nb–Nb<sub>[011]</sub> несоответствие межатомных расстояний равно:

$$F = \frac{2(0,4667 - 0,4648)}{0,4667 + 0,4648} = 0,00407,$$

или 0,407% от длины связи Nb–Nb в матрице или 0,0150 нм. Если принять расстояние Nb–Nb в матрице 0,4667 нм за 100%, то  $100:0,407=245,70$ , т. е. через 245 связей Nb–Nb

произойдет полное совпадение атомов. Таким образом, период совпадения узлов в ряду атомов жестких нерелаксированных сеток вдоль направления  $[110]$  обеих структур составит  $A_{PCY} = 245 \cdot 0,4667 = 114,3415$  нм.

На основании этих результатов и понятия решетки совпадающих узлов можно сделать вывод о том, что величина несоответствия в плоскостях на интерфейсе составляет  $\sim 3,8\%$  в атомных рядах вдоль направления  $[001]$  обеих фаз и на порядок меньше:  $0,4\%$  – вдоль направлений  $[110]$ . Для такой малой ( $<10\%$ ) величины несоответствия компенсация на межфазных границах может осуществляться за счет упругих деформаций сопрягающихся решеток, без образования дефектов кристаллического строения – в частности, дислокаций [9]. Для межфазных границ с малым несоответствием релаксация приводит к образованию некоторой средней решетки, период которой может быть записан как

$$\tilde{a} = \frac{a_1 + a_2}{2}.$$

Для релаксированной усредненной решетки параметры PCY межфазной поверхности составят:

$$A_{PCY_{Nb-\alpha}} = \frac{0,4667 + 0,4648}{2} = 0,4658 \text{ нм};$$

$$C_{PCY_{Nb-\alpha}} = \frac{0,2972 + 0,2858}{2} = 0,2915 \text{ нм}.$$

*Кристаллохимический и геометрический анализ интерфейса фаз  
ОЦК Nb и тетрагонального  $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  силицида*

Структура тетрагонального  $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  силицида значительно отличается от низкотемпературной  $\alpha$ -модификации (см. таблицу). Атомы Nb и Si в структуре  $\beta$ -силицида занимают по две неэквивалентные позиции (рис. 3), и в плоскости сопряжения представлены атомы всех структурных позиций  $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ , причем центры атомов Nb1 и Si1 лежат в плоскости сопряжения  $(2\bar{1}0)_\beta$ , а центры атомов Nb2 и Si2 несколько смещены относительно этой плоскости (рис. 5).

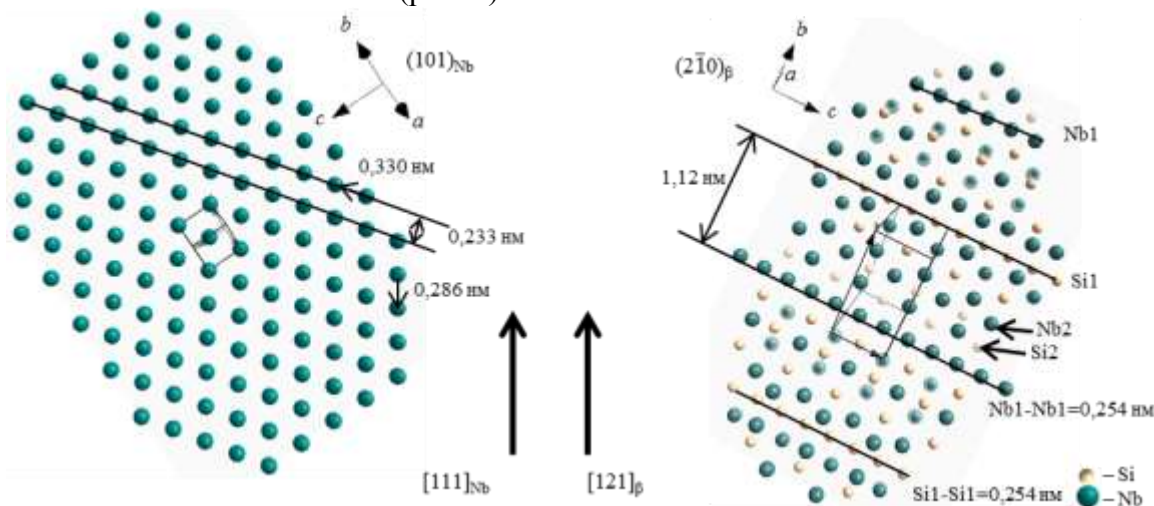


Рис. 5. Модели атомной структуры плоскостей сопряжения  $(101)$  ниобия и  $(2\bar{1}0)$  силицида  $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  (сетки атомов обеих фаз ориентированы в соответствии с направлениями  $[111]_{Nb} \parallel [121]_\beta$ )

Из сравнения сопрягающихся нерелаксированных атомных сеток видно, что в направлении  $[001]_\beta$  имеется угловое соответствие рядов атомов матрицы Nb и рядов атомов силицидной фазы Nb1 и Si1.

Окружение атомов в обеих фазах имеет псевдогексагональную конфигурацию. В ниобиевой матрице межатомное расстояние Nb–Nb в плоскости (101) равно 0,286 и 0,330 нм. В фазе β-силицида межатомное расстояние Nb–Nb; Nb–Si и Si–Si изменяется от 0,254 до 0,314 нм.

Среднее расстояние в матрице  $Nb \approx Nb = 0,308$  нм и среднее расстояние пар атомов в силициде  $\beta-Nb_5Si_3 - (Nb-Nb, Nb-Si \text{ и } Si-Si)_\beta = 0,284$  нм, разница равна  $\tilde{\Delta} = 0,024$  нм, что соответствует величине размерного несоответствия сопрягающихся решеток, равного 7,8%. Для межфазных границ с несоответствием <10% [9] компенсация может осуществляться за счет упругой деформации с образованием некоторой решетки со средним периодом  $\sim 0,3$  нм без возникновения дефектов кристаллического строения.

*Кристаллохимический и геометрический анализ интерфейса фаз в системе ОЦК Nb–ГПУ  $\gamma-Nb_5Si_3$*

На рис. 6 приведены расчетные модели атомной структуры плоскостей сопряжения (110) матрицы и (10 $\bar{1}$ 0) армирующей фазы  $\gamma-Nb_5Si_3$  силицида, параметры которых приведены в таблице, ориентированные в соответствии с найденными экспериментально кристаллографическими направлениями:  $[111]_{Nb}$  и  $[0001]_\gamma$  [22].

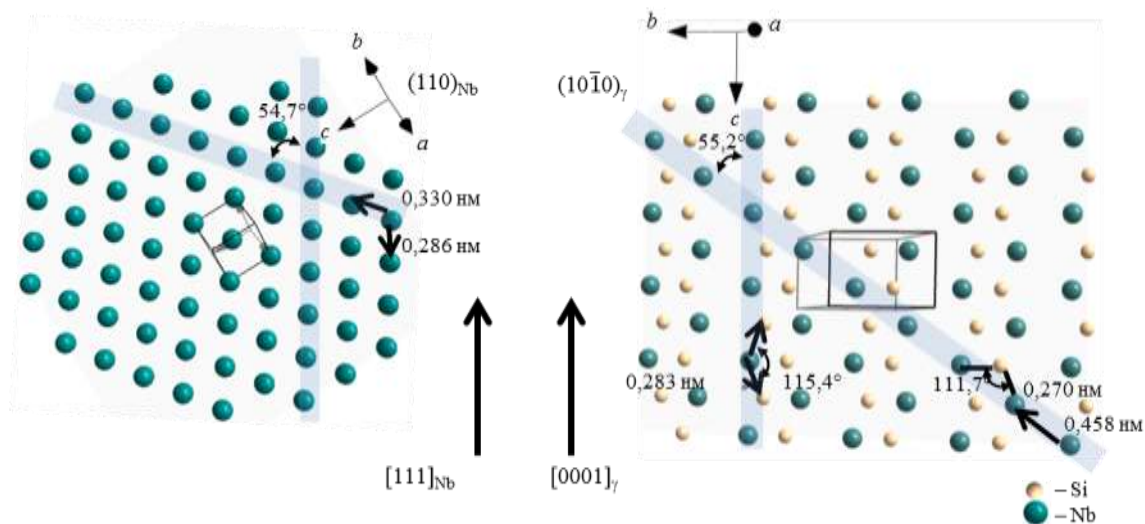


Рис. 6. Модели атомной структуры плоскостей сопряжения (110) ниобия и (10 $\bar{1}$ 0) силицида  $\gamma-Nb_5Si_3$  (сетки атомов обеих фаз ориентированы в соответствии с направлениями роста  $[111]_{Nb}||[0001]_\gamma$ )

Атомы Nb в структуре  $\gamma$ -силицида занимают две неэквивалентные позиции (рис. 3), причем плоскость сопряжения силицида представлена атомами Nb1 и Si.

Из сравнения сопрягающихся нерелаксированных сеток видно, что атомы ниобия в обеих фазах располагаются рядами, пересекающимися под углом 54,7 градусов в ниобиевой фазе и 55,2 градусов в силициде, т. е. ряды атомов ниобия находятся в угловом согласии в плоскостях сопряжения. В то же время в направлении роста атомные ряды ниобия чередуются через два с зигзагообразными цепочками атомов кремния и роста угол атома ниобия с ближайшими двумя атомами кремния составляет 115,4 градусов.

В структуре силицида межатомное расстояния Nb–Si в вертикальном ряду составляет 0,283 нм, что очень близко к расстоянию Nb–Nb в матрице в этом же направлении: 0,286 нм, тогда параметр несоответствия в этом случае равен:

$$F = \frac{2(0,285 - 0,283)}{0,285 + 0,283} \approx 0,007$$

или 0,7%, и компенсация размерного несоответствия в направлении роста будет осуществляться, по-видимому, за счет упругой деформации посредством смещения как атомов кремния в решетке силицида, так и атомов ниобия в матрице Nb. Период PCY для релаксированной решетки межфазной поверхности в направлении роста можно представить как усредненный параметр:

$$C_{PCY_{Nb-\gamma}} = \frac{0,283+0,285}{2} = 0,284 \text{ нм.}$$

В атомных рядах, расположенных под углом 55 градусов к направлению роста, компенсационные процессы более сложные. Данное направление пересекает в силициде чередующиеся зигзагообразные цепочки атомов кремния и «пустые пролеты» между двумя рядами атомов ниобия. Угол атома кремния с ближайшими атомами ниобия составляет 111,7 градусов, с расстоянием Nb–Si: 0,270 нм, а в «пролете» Nb–Nb<sub>γ</sub>: 0,458 нм. Расстояние Nb–Nb в матрице в данном направлении составляет 0,330 нм. Если посчитать величину несоответствия для межатомных расстояний, то получится, что она постоянно меняется от -22 до +28%. В таком случае будет целесообразно использовать параметр PCY. В период PCY укладывается четыре межатомных расстояния матрицы Nb–Nb=4·0,330=1,32 нм и три межатомных расстояния силицида Nb–Nb<sub>γ</sub>=3·0,460=1,38 нм. Параметр несоответствия жестких нерелаксированных решеток составит 4,3%. Исходя из малой (<10%) величины параметра несоответствия на интерфейсе в этом атомном ряду, можно предположить, что компенсация будет происходить за счет упругих искажений. В то же время, если при кристаллохимическом анализе в данном атомном ряду проанализировать период повторяемости, то очевидно отсутствие компенсации в периоде PCY по кремнию (рис. 7), что может являться причиной формирования краевых дислокаций [22].

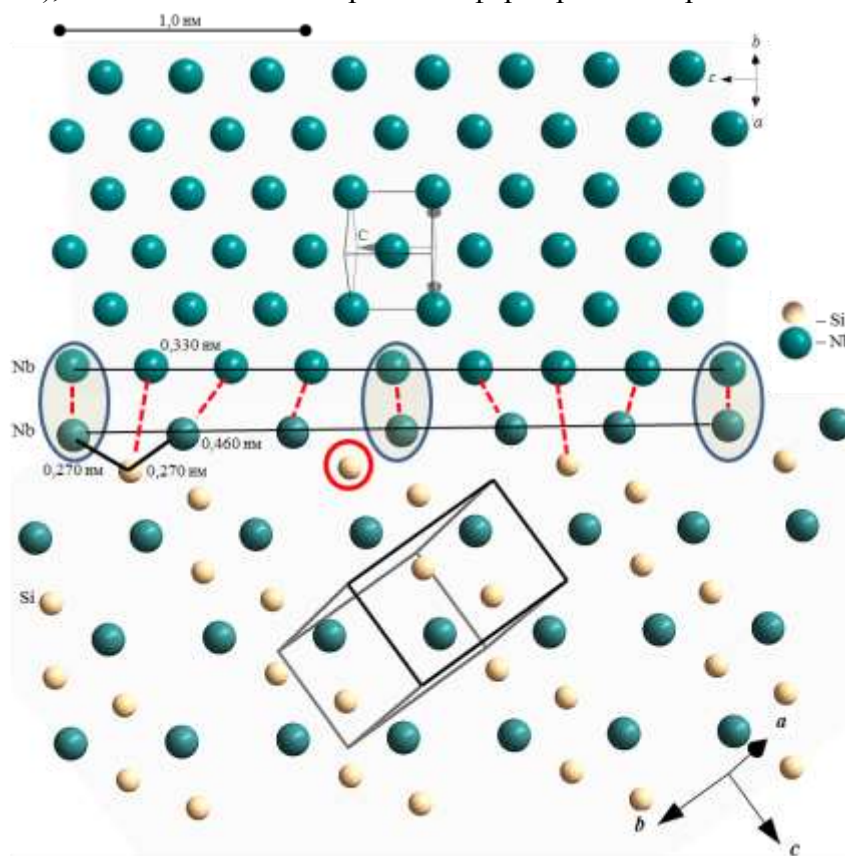


Рис. 7. Схема возможного сопряжения атомов ниобия и силицида  $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  в рядах, расположенных под углом 55 градусов к направлению роста (показано отсутствие компенсации в периоде решетки совпадающих узлов по кремнию)

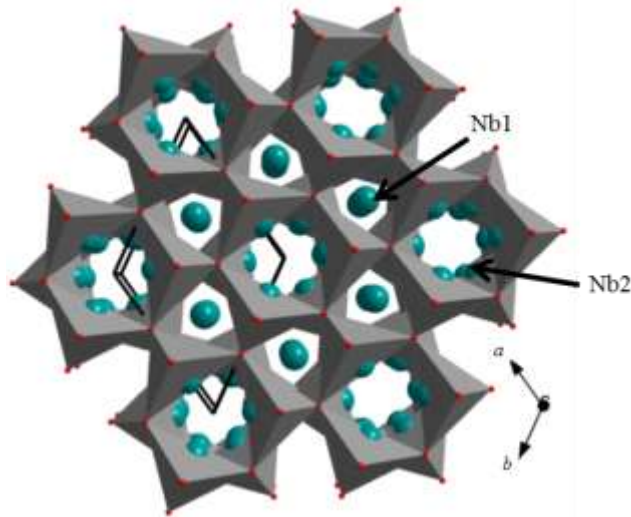


Рис. 8. Фрагмент кристаллической структуры  $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  перпендикулярно направлению  $\langle 0001 \rangle$  – для визуализации каналов структуры выделены полиэдры Nb2 (кремний в вершинах полиэдров)

В гексагональной модификации силицида атомы ниобия занимают две кристаллографически неэквивалентные позиции – Nb1 и Nb2 (рис. 3 и 8) и атомы Nb2 в  $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  образуют вдоль направления  $[0001]$  структуры каналы. Именно эти каналы являются причиной высокой диффузионной проницаемости силицида данной модификации [23].

Поскольку на поверхности раздела фаз присутствуют только атомы Nb2, то в композите с армирующей фазой  $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  интерфейс будет характеризоваться более высокой диффузионной проницаемостью в направлении роста, по сравнению с другими модификациями силицида  $\text{Nb}_5\text{Si}_3$ .

### Заключения

1. На основании проведенного кристаллохимического и геометрического анализа межфазной границы в композите Nb– $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  с использованием понятия РСУ, определена величина несоответствия межатомных расстояний в сопрягающихся плоскостях, которая равна 3,8% в ряду атомов, перпендикулярном направлению роста, и на порядок меньше: 0,4% – вдоль направления роста. При таких малых (<10%) величинах несоответствия, компенсация на межфазной границе может происходить за счет упругих деформаций сопрягающихся решеток, без возникновения дефектов кристаллического строения.

2. В композите Nb– $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ , исходя из разницы средних межатомных расстояний в матрице и в силициде  $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ , величина размерного несоответствия сопрягающихся решеток составляет 7,8%. Для межфазных границ с несоответствием <10%, компенсация может осуществляться за счет упругой деформации и образования средней решетки с периодом  $\sim 0,3$  нм, без возникновения дефектов кристаллического строения.

3. Кристаллохимический и геометрический анализ плоскостей сопряжения в композите Nb– $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  выявил, что в направлении роста компенсация несоответствия будет осуществляться, по-видимому, за счет упругой деформации, посредством смещения как атомов кремния в решетке силицида, так и атомов ниобия в матрице Nb.

4. В направлении под углом 55 градусов к направлению роста в композите Nb– $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$  прогнозируется наибольшее напряжение на поверхности раздела (из-за отсутствия компенсации в периоде РСУ по кремнию), что может являться причиной формирования краевых дислокаций.

5. Присутствие на поверхности раздела в композите Nb– $\gamma$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> атомов ниобия, образующих каналы в гексагональной структуре силицида, приведет к тому, что в композите с армирующей фазой  $\gamma$ -Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> интерфейс будет характеризоваться более высокой диффузионной проницаемостью в направлении роста, по сравнению с другими модификациями силицида Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Оспенникова О.Г. Тенденции создания жаропрочных никелевых сплавов низкой плотности с поликристаллической и монокристаллической структурой (обзор) // Авиационные материалы и технологии. 2016. №1 (40). С. 3–19. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-1-3-19.
2. Оспенникова О.Г. Итоги реализации стратегических направлений по созданию нового поколения жаропрочных литейных и деформируемых сплавов и сталей за 2012–2016 гг. // Авиационные материалы и технологии. 2017. №S. С. 17–23. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-S-17-23.
3. Базылева О.А., Оспенникова О.Г., Аргинбаева Э.Г., Летникова Е.Ю., Шестаков А.В. Тенденции развития интерметаллидных сплавов на основе никеля // Авиационные материалы и технологии. 2017. №S. С. 104–115. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-S-104-115.
4. Каблов Е.Н., Светлов И.Л., Ефимочкин И.Ю. Высокотемпературные Nb–Si-композиты // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Машиностроение. 2011. №SP2. С. 164–173.
5. Светлов И.Л., Кузьмина Н.А., Нейман А.В. и др. Влияние скорости кристаллизации на микроструктуру, фазовый состав и прочность *in-situ* композита Nb/Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> // Известия Российской академии наук. Сер.: Физическая. 2015. Т. 79. №9. С. 1294–1299.
6. Тимофеева О.Б., Колодочкина В.Г., Шванова Н.Ф., Нейман А.В. Исследование микроструктуры высокотемпературного естественно композиционного материала на основе ниобия, упрочненного интерметаллидами силицида ниобия // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34). С. 60–64. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-60-64.
7. Щетанов Б.В., Ефимочкин И.Ю., Паэгле С.В., Карачевцев Ф.Н. Исследование высокотемпературной прочности *in-situ*-композитов на основе Nb, армированных монокристаллическими волокнами  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // Авиационные материалы и технологии. 2016. №3 (42). С. 53–59. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-3-53-59.
8. Лощинин Ю.В., Дмитриева В.В., Пахомкин С.И., Размахов М.Г. Теплофизические свойства компактированных композитов системы Nb–Si в диапазоне температур от 20 до 1400°C // Авиационные материалы и технологии. 2017. №2 (47). С. 41–49. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-2-41-49.
9. Косевич В.М., Иевлев В.М., Палатник Л.С., Федоренко А.И. Структура межкристаллитных и межфазных границ. М.: Металлургия, 1980. С. 256.
10. Иевлев В.М., Прижимов А.С. Межзеренные и межфазные границы в кристаллических материалах // Вестник ТГУ. Т. 15. Вып. 3. 2010. С. 780–782.
11. Савицкий Е.М., Ефимов Ю.В., Бодак О.И. и др. Система ниобий–кремний–углерод // Неорганические материалы. 1981. Т. 17. №12. С. 2207–2210.
12. Кочержинский Ю.А., Юпко Л.М., Шишкин Е.А. Диаграмма состояния Nb–Si // Известия академии наук СССР. Сер.: Металлы. 1980. С. 206–211.
13. Aronsson B. The crystal structure of Mo<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> and W<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> // Acta Chemica Scandinavica. 1955. Vol. 9. P. 1107–1110.
14. Schachner H., Cerwenka E., Nowotny H.N. Neue Silizide vom M<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>-Typ mit D 88-Struktur // Journal of the American Ceramic Society. 1982. Vol. 65. P. 260–265.
15. Светлов И.Л. Высокотемпературные Nb–Si композиты // Материаловедение. 2010. №9–10. С. 18–38.
16. Xiao Ma, Xiping Guo, Maosen Fu, Haisheng Guo. Crystallographic characteristics of an integrally directionally solidified Nb–Ti–Si based *in-situ* composite // Scripta Materialia. 2017. Vol. 139. P. 108–113.

17. Sekido N., Hildal K., Sakidja R., Perepezko J.H. Stability of the Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> phase in the Nb–Mo–Si system // *Intermetallics*. 2013. Vol. 41. P. 104–112.
18. Wang F., Luo L., Meng X. et al. Morphological evolution of primary β-Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> phase in Nb–Mo–Si alloys // *Journal of Alloys and Compounds*. 2018. Vol. 741. P. 51–58.
19. Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов. М.: ГЕОС, 2012. 428 с.
20. Каблов Е.Н., Кузьмина Н.А., Еремин Н.Н., Светлов И.Л., Нейман А.В. Атомные модели структуры силицидов ниобия в in-situ композитах Nb–Si // *Журнал структурной химии*. 2017. №3. С. 564–570.
21. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // *Авиационные материалы и технологии*. 2015. №1 (34). С. 3–33. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33.
22. Светлов И.Л., Кузьмина Н.А., Заводов А.В., Зайцев Д.В. Термическая стабильность поверхностей раздела между ниобиевой матрицей и γ-Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> силицидом в композите на основе системы Nb–Si // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн.* 2018. №8 (68). Ст. 03. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 12.11.2018). DOI: 10.18577/2307-6046-2018-0-8-28-37.
23. Марченко Е.И., Кузьмина Н.А., Еремин Н.Н. Локализация позиций примесей углерода в кристаллических структурах полиморфных модификаций Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> по данным атомистического компьютерного моделирования // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн.* 2017. №3 (51). Ст. 04. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 12.11.2018). DOI: 10.18577/2307-6046-2017-0-3-4-4.