

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronic Technics. 2014, vol. 17, no. 1, pp. 58–64.

Structure, Phase Composition and Mechanical Properties of ZrO_2 Partially Stabilized with Y_2O_3

Borik Mikhail Aleksandrovich¹ — Candidate of Technical Sciences, Senior Researcher, e-mail: borik@lst.gpi.ru; **Bublik Vladimir Timofeevich**² — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor; **Vilkova Maria Yuryevna**³ — Graduate Student; **Kulebyakin Alexey Vladimirovich**¹ — Candidate of Technical Sciences, Senior Researcher; **Lomonova Elena Evgenyevna**¹ — Doctor of Technical Sciences; **Milovich Philippe Olegovich**² — Engineer; **Myzina Valentina Alekseevna**¹ — Researcher; **Ryabochkina Paulina Anatolyevna**³ — Associate Professor; **Tabachkova Natalia Yuryevna**² — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: ntabachkova@gmail.com; **Ushakov Sergey Nikolayevich**¹ — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher.

¹A. M. Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, 119991, Russia, Moscow, Vavilov Str., 38; ²National University of Science and Technology «MISiS», 119049, Russia, Moscow, Leninskiy prospekt 4; ³Ogarev Mordovia State University, 430005, Russia, Republic of Mordovia, Saransk, Bolshevistskaya Str., 68.

Abstracts. The structure of PSZ crystals has been studied as a function of the content of the stabilizing impurity (Y_2O_3) by X-ray diffraction, transmission electron microscopy (TEM) and atomic-force microscope (AFM). The hardness and fracture toughness have been measured by microindentation. The study has shown that PSZ crystals obtained by directional solidification of the melt consist of two tetragonal phases (t and t') with varying degrees of tetragonality. Increasing the stabilizing impurity concentration leads to an increase in the volume fraction of the “untransformable” t' phase. Experiments have shown that an increase in the concentration of the stabilizing impurity leads to a growth in the amount of positively charged oxygen vacancies (the F^{++} -centers) which increase the lattice parameter and stabilize the structure. The character of the twinned structure changes depending on the concentration of the stabilizing impurity. In PSZ crystals with Y_2O_3 concentration from 2.8 to 3.2 mol. % twins first, second and third orders as well as large twins consist of smaller twin domains are observed. At high concentrations of stabilizing impurities (3.7–4.0 mol. %) the twin structure becomes smaller and more uniform. This suggests that twinning occurs simultaneously and is localized within small volumes. The character of the twinned structure changes depending on the concentration of the stabilizing impurity. This work shows that the quantity of hardening (fracture toughness) is proportional to the content of the transformable t phase.

Keywords: partially stabilized zirconia, high strength materials, biologically inert material, twin domains structure, transmission electron microscopy, X-ray diffraction.

References

1. Osiko V. V., Borik M. A., Lomonova E. E. Synthesis of refractory materials by skull melting. *Technique Springer Handbook of crystal growth*. 2010, no. 353, chap. 14, pp. 432–477.
2. Badwal S. P. S., Bannister M. J., Hannink R. H. J. Science and technology of zirconia V. Lancaster; Basel: Technomic Publ. Co., 1993. 858 p.
3. Hannink R. H. J., Kelly P. M., Muddle B. C. Transformation toughening in zirconia-containing ceramics. *J. Amer. Cer. Soc.* 2000, vol. 83, no. 3, pp. 461–487.
4. Grigorovich V. K. Hardness and microhardness of metals. Moscow: Nauka, 1976. 230 p. (In Russ.).
5. Borik M. A., Bublik V. T., Kulebyakin A. V., Lomonova E. E., Milovich F. O., Myzina V. A., Osiko V. V., Tabachkova N. Y. Phase composition, structure and mechanical properties of PSZ (partially stabilized zirconia) crystals as a function of stabilizing impurity content. *J. Alloys and Comp.* 2014, vol. 586, pp. 231–235.
6. Akimov G. Ja., Marinin G. A., Kamenova V. Ju. Evolution of phase structure and physical and chemical properties of ceramics of ZrO_2 — 4 mol. %. *Fizika tverdogo tela*. 2004, vol. 46, no. 2, pp. 250–252. (In Russ.).
7. Yamashita I., Tsukuma K. Phase separation and hydrothermal degradation of 3 mol. % Y_2O_3 – ZrO_2 ceramics. *J. Ceramic Soc. of Jap.* 2005, vol. 113, no. 8, pp. 530–533.
8. Yamashita I., Tsukuma K. Synchrotron X-ray study of the crystal structure and hydrothermal degradation of yttria-stabilized tetragonal zirconia polycrystal. *J. Amer. Ceram. Soc.* 2008, vol. 91, no. 5, pp. 1634–1639.
9. Eichler A. Tetragonal Y-doped zirconia: Structure and ion conductivity. *Phys. Rev.* 2001, vol. 64, no. 17.
10. Ganduglia-Pirovano M. V., Hofmann A., Sauer J. Oxygen vacancies in transition metal and rare earth oxides: Current state of understanding and remaining challenges. *Surf. Sci. Rep.* 2007, no. 63, pp. 219–270.
11. Safonov A. A., Bagatur'yants A. A., Korkin A. A. Oxygen vacancies in tetragonal ZrO_2 : ab initio embedded cluster calculations. *Microelectronic Engineering*. 2003, no. 69, pp. 629–632.
12. Borik M. A., Bublik V. T., Kulebyakin A. V., Lomonova E. E., Milovich F. O., Myzina V. A., Osiko V. V., Seryakov S. V., Tabachkova N. Y. Structure and mechanical properties of crystals of partially stabilized zirconia after thermal treatment. *Phys. of the Solid State*. 2013, vol. 55, no. 8, pp. 1690–1696.

Acknowledgements: This work has been performed within project No. 16.1733.2014/K of the competitive part of the State task for universities subordinated to the Ministry of Education of Russia in the field of scientific activities for 2014–2016..

This work is performed with the financial support of the Russian Federal Property Fund (Project No. 13–02–12051 ofi_m) and the OPTEK Company.

Received Dec. 09, 2013

РЕШЕНИЕ

МЕЖДУНАРОДНОГО СИМПОЗИУМА «ФИЗИКА КРИСТАЛЛОВ 2013», ПОСВЯЩЕННОГО 100-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ ПРОФЕССОРА М. П. ШАСКОЛЬСКОЙ

С 28 октября по 2 ноября 2013 г. в Национальном исследовательском технологическом университете «МИСиС» прошел Международный Симпозиум «Физика кристаллов 2013», объединивший Пятую Международную конференцию по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века» и Третьи Московские чтения по проблемам прочности материалов.

Организаторы Симпозиума: Научный совет РАН по физике конденсированных сред, РФФИ, Межгосударственный координационный совет по физике прочности

и пластичности материалов, НИТУ «МИСиС», ФГБУН Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, ОАО «Гиредмет» ГНЦ РФ, Институт металловедения и физики металлов ГНЦ РФ «ЦНИИЧермет им. И. П. Бардина», Представительства в России и СНГ Zwick GmbH & Co. KG и ООО «Ниеншанц Сайнтифик».

Целью Симпозиума является:

– повышение уровня подготовки научных и научно-педагогических кадров и эффективное освоение молодыми исследователями и преподавателями лучших научных

и методических отечественных и мировых достижений в области материаловедения, динамики дислокаций, физики пластичности и прочности материалов и физики кристаллов;

– привлечение талантливой молодежи к участию в перспективных научных исследованиях по созданию новых функциональных материалов и технологий, применению кристаллов в квантовой электронике, акустооптике, сцинтилляционной технике, лазерной технике;

– повышение уровня науки и образования за счет кооперации и мобильности ученых.

Симпозиум посвящен памяти выдающегося ученого в области кристаллофизики, теории и динамики дислокаций, кристаллографа, профессора, доктора физ.-мат. наук, организатора кафедры кристаллографии (физики кристаллов) МИСиС Марианны Петровны Шаскольской (1913—1983 гг.). Памяти М. П. Шаскольской университет МИСиС провел четыре Международные конференции по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века». Конференции получили высокие оценки научной общест-венности РФ и зарубежья. Анализ динамики участия в конференциях с 1998 по 2013 г. показал, что наблюдается увеличение интереса к конференции и расширение и углубление научных направлений в соответствии с современными тенденциями развития высоких технологий, с каждым годом увеличивается среди участников конференции количество молодых ученых.

В 2013 г. состав докладчиков Международного Симпозиума «Физика кристаллов 2013» охватывал все основные научные и научно-производственные центры России. География докладчиков широка, докладчики приехали из 49 городов, из России, из ближнего и дальнего зарубежья (Азербайджан, Белоруссия, Молдавия, Узбекистан, Украина, Эстония, Болгария, Венгрия, Вьетнам, Дания, Канада, Польша, США, ФРГ, Франция — 36 человек).

На Симпозиуме было зарегистрировано 286 докладов, в заседаниях участвовало более 360 человек, из них молодых ученых, аспирантов, студентов более 100 человек. Заслушаны 31 пленарный доклад и 90 устных докладов, представлено более 130 стендовых докладов. Работали следующие секции:

1. Чтения по проблемам прочности материалов.
2. Семинар «Износостойкость материалов и покрытий».
3. Физика кристаллов. Структура, дефекты и анизотропия свойств кристаллов.
4. Физика кристаллов. Наноматериалы и нанотехнологии.
5. Функциональные материалы. Пьезо- и сегнетозлектрики. Материалы квантовой электроники. Сцинтилляторы.
6. Физические основы получения полупроводников и новых функциональных материалов.
7. Молодежная секция по проблемам прочности и по физике кристаллов.

Проведен круглый стол памяти М. П. Шаскольской и ее коллег и учеников.

Проведены экскурсии в Научно-исследовательский ЦКП НИТУ МИСиС «Материаловедение и металлургия» и в Музей истории МИСиС.

Организована демонстрация нанотвердомера фирмы ООО «Ниеншанц Сайнтифик» и испытательных машин фирмы Zwick GmbH & Co. KG для определения механических свойств и проведения усталостных испытаний.

Следует отметить, что 95 из 286 представленных на Симпозиуме докладов явились результатом работ, под-держанных государственными научными программами

РАН и Минобрнауки. Среди представленных на Симпозиуме работ 10 выполнены по ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009—2013 гг.», 5 — по ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России за 2007—2013 годы», 8 — по решению Президиума РАН, 9 — по заказу Минобрнауки по программе «Развитие научного потенциала высшей школы», 63 работы поддержаны грантами (РФФИ).

Тематика докладов Симпозиума соответствует тематике основных направлений развития научно-технического комплекса РФ в области фундаментальных и прикладных вопросов физики кристаллов, материаловедения и проблем прочности кристаллических материалов и металлов.

А. М. Глезер посвятил свой доклад новым путям создания многофункциональных конструкционных материалов нового поколения (Институт металловедения и физики металлов ГНЦ РФ «ЦНИИчермет им. И. П. Бардина»).

Ф. М. Шахов представил новые результаты работы большого коллектива, полученные в области синтеза новых материалов — самоорганизации алмазных нанокристаллов. Впервые экспериментально показано, что при спекании наноалмазов детонационного синтеза возможно формирование объемных кристаллов алмаза (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН).

Доклад О. Д. Вольпьяна был посвящен методам получения градиентных материалов для фотоники (НИТУ «МИСиС», ГНЦ РФ «Гиредмет», НИИ «Полус»). Достигнут прогресс в развитии наноионики, где для детального описания процессов ионного транспорта на функциональных гетеропереходах предложен новый структурно-динамический подход (ИПТМ РАН, г. Черноголовка).

В ряде докладов секции чтений по прочности были представлены результаты воздействия электромагнитных полей на пластичность и прочность материалов. Достигнут значительный прогресс в изучении резонансной магнитопластичности кристаллов в сверхнизких скрещенных полях, включая магнитное поле Земли (Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН). Выявлена роль пинч-эффекта в явлении электропластичности в металлах (Институт машиноведения им. А. А. Благонравова РАН). Изучена физика автоволновых явлений при деформировании кристаллов (Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск). Исследованы новые моды бездислокационной деформации и их роль в механоактивации, обнаружена суперлокализация высокотемпературной пластической деформации ковалентных кристаллов (ИК РАН). Показано влияние импульсного электрического тока на структурную релаксацию аморфных и нанокристаллических сплавов, (ТГУ им. Г. Р. Державина, г. Тамбов.). Изучены прочность синтетических кристаллов алмаза и дефекты их структуры (Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, г. Москва). Открыт новый эффект «встроенных зон», новой разновидностью пластического течения в результате модифицированного крипа Херринга-Набарро (ННЦ Харьковский Физико-технический институт НАН Украины, ВНИИ неорганических материалов им. академика А. А. Бочвара).

В работах семинара «Износостойкость материалов и покрытий» отмечено, что использование легированных алмазоподобных нанокompозитных покрытий является одним из перспективных направлений для создания триботехнических покрытий с высокими противоизносными и антифрикционными свойствами и представляет значительный интерес для практического использования в

уздах трения, (ИМАШ РАН, ЗАО «ИНАКОТЕК», НИТУ «МИСиС», МГУ им. М. В. Ломоносова).

Симпозиум считает необходимым развитие методов оценки износостойкости, когезионной и адгезионной прочности покрытий, твердости и других механических характеристик материалов и покрытий путем применения современных средств измерений и стандартизации методик измерений.

Симпозиум отмечает, что на основе пьезоэлектрических структур « $Me_1/AlN/Me_2/(100)алмаз$ » созданы новые акустоэлектронные устройства — высокочастотные резонаторы и сенсоры давления, работоспособные в СВЧ-диапазоне. Впервые получено возбуждение акустических обертонов на рекордно высоких частотах около 20 ГГц (ФТБНУ ТИСНУМ, г. Москва, г. Троицк).

Созданы новые углеродные сверхрешетки на основе двухслойного графена, их уникальные механические, электронные и оптические свойства и стабильность структур являются перспективной основой для создания наноэлектронных устройств (Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, г. Москва).

Симпозиум отмечает работы Института сцинтилляционных материалов НАНУ Украины по разработке легирования оксидных монокристаллов вольфрамом и высокосоввершенных и однородных монокристаллов иодида цезия — высококачественных сцинтилляционных материалов для физики высоких энергий и медицинской техники. В Институте геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН (г. Новосибирск), предложены новые сцинтилляционные кристаллы, легированные редкоземельными элементами, на основе иодида стронция с коротким временем затухания для высокоэффективной регистрации ионизирующего излучения.

Симпозиум отмечает успехи Института мониторинга климатических и экологических систем СО РАН (г. Томск), по созданию современной технологии выращивания высокосоввершенных монокристаллов для решения прикладных задач нелинейной оптики.

В НИТУ МИСиС (проф. Ю. Х. Векилов) проведены исследования физических свойств квазикристаллов с апериодическим дальним атомным порядком и симметрией, запрещенной для периодических структур. Изучены свойства квазикристаллов для оптимизации их практических приложений.

Новые экспериментальные исследования оптической стойкости матричных фотоприемников на основе тепловой модели на многослойных полупроводниковых структурах с квантовыми ямами и создание детекторов ИК-излучения с высокими параметрами на гетероэпитаксиальных структурах полупроводниковых материалов были представлены в докладах М. В. Сахарова, В. Г. Средин, Н. Х. Талипова, А. В. Войцеховского (Военная Академия РВСН им. Петра Великого, г. Москва; ТГУ, г. Томск).

Развитие современной акустоэлектроники требует применения новых пьезоэлектрических кристаллов с высокими значениями пьезоконстант и хорошими пьезоэлектрическими свойствами. В НИТУ «МИСиС» и в ИПТМ РАН совместно с ОАО «Фомос-Материалс» проведены комплексные исследования кристаллов семейства лангасита, материала современной пьезотехники. Симпозиум отмечает, что кристаллы семейства лангасита, выращи-

ваемые в РФ, являются наиболее перспективными в ряде крайне важных сфер применения — в качестве высокотемпературных датчиков вибрации, давления и других механических характеристик.

Получили дальнейшее развитие вопросы кристаллизации аморфных фаз, предложена классификация реакций кристаллизации тонких аморфных пленок по структурно-морфологическим признакам (проф. А. Г. Багмут, НТУ «ХПИ», г. Харьков) и новая микрокристаллическая модель аморфного состояния (проф. В. Ю. Колосов, Институт естественных наук УрФУ, г. Екатеринбург).

Отмечено повышение количества научных центров, занимающихся получением и управлением доменных структур в сегнетоэлектрических кристаллах, в том числе путем формирования самоорганизованных ансамблей изолированных нанодоменов. Наблюдается расширение сферы применения таких доменных структур для доменной инженерии — создание регулярных прецизионных доменных структур для нелинейно-оптических устройств, для элементов оперативной памяти электронных устройств, для производства актюаторов малых перемещений, для оптических волноводов. Создана универсальная теория эволюции размеров доменов в одномерных системах с дефектами. (ИПТМ РАН, г. Черноголовка, Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева КНЦ РАН, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, НИТУ «МИСиС», Уральский центр коллективного пользования «Современные нанотехнологии», Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)

Симпозиум отмечает необходимость развития работ по получению моно- и поликристаллических алмазов для силовой оптики и электроники, что позволит получить прорывные результаты и значительный экономический эффект в прикладной лазерной оптике и в электронике (НЦЛСК «Астрофизика», г. Москва, ИОФ им. А. М. Прохорова РАН).

Симпозиум отмечает практическую целесообразность медицинской ориентации ряда докладов на секциях. Новые геометрические и кристаллофизические подходы к моделированию биологических объектов представлены в докладе С. Б. Рошала, (Физический факультет Южного Федерального университета, г. Ростов-на-Дону. Получил высокую оценку доклад А. В. Конопляникова о результатах и перспективах применения детонационных наномалмазов с ингибиторами раковых стволовых клеток как эффективных потенциальных лекарственных препаратов в онкологии (ФГБУ Медицинский радиологический научный центр МЗ РФ, г. Обнинск).

Участники Симпозиума отмечают, что вечер памяти М. П. Шаскольской был не только вечером воспоминаний, но и оценкой возрастающей в настоящее время значимости научных достижений М. П. Шаскольской в области кристаллофизики, динамики и теории дислокаций.

Учитывая высокий научный и практический уровень представленных докладов, четкую организацию Оргкомитетом и Программным комитетом заседаний Симпозиума и пожелания научного сообщества РФ, участники Симпозиума считают целесообразным проведение следующего Международного Симпозиума по физике кристаллов на базе НИТУ «МИСиС» через 2 года.