ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/133

**РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ УПРУГИХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК НИТРИДОВ МЕТАЛЛОВ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ
СИСТЕМЫ Ti-AL-TA-N**

^{1,2}Еремеев С.В., ^{1,2}Дмитриев А.И., ¹Шугуров А.Р.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²Томский государственный университет, Томск, Россия

Нанесение износостойких защитных покрытий на сегодняшний день является одним из эффективных способов повышения эксплуатационных характеристик конструкций и механизмов, используемых в промышленности. Несмотря на то, что для получения износостойких защитных покрытий используется большое число материалов, различающихся по типу химической связи, ни один из них не способен обеспечить полный набор необходимых эксплуатационных свойств. Перспективным направлением решения данной проблемы является нанесение многокомпонентных покрытий, а также многослойных композиций, в составе которых чередуются слои различных материалов. Среди многообразия многокомпонентных покрытий, обладающих повышенными твердостью и износостойкостью, наиболее востребованными на сегодняшний день являются покрытия на основе нитридов переходных металлов, в особенности системы Ti-Al-N, легированных элементами IV и V групп (Zr, Hf, Nb и Ta) [1].

В работе выполнены первопринципные расчеты упругих и энергетических характеристик нитридов металлов четырехкомпонентной системы Ti-Al-Ta-N, необходимых для построения численной модели в рамках метода молекулярной динамики. Отдельное внимание уделено строению кристаллической решетки многокомпонентных нитридов с различным относительным содержанием Ti, Al и Ta. Известно, что AlN и TaN в равновесном состоянии характеризуются гексагональным строением решетки. Однако в высоконеравновесных покрытиях системы Ti-Al-Ta-N, напыляемых методами физического осаждения из паровой фазы, формируется метастабильная кубическая фаза, как показано на рисунке 1. Данная фаза представляет собой твердый раствор Ti-Al-Ta-N, в котором алюминий и тантал замещают титан в кубической кристаллической решетке TiN [2]. Последнее приводит к уменьшению параметра решетки и ее упругой дисторсии и, как следствие, к твердорастворному упрочнению материала покрытия.

Рисунок 1. Кристаллическая решетка четырехкомпонентной системы Ti-Al-N-Ta наносимого покрытия

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Расчет электронной структуры кубической фазы Ti-Al-Ta-N и анализ характера формирующихся в ней химических связей свидетельствует об увеличении ее вязкости разрушения по сравнению с трехкомпонентной системой Ti-Al-N, что весьма важно с точки зрения повышения износостойкости покрытий. Показано, что указанное повышение вязкости разрушения обусловлено изменением электронной структуры твердого раствора за счет внедрения атомов Ta, что приводит к усилению металлического характера связей в кристаллической решетке и способствует уменьшению ее сопротивлению сдвига.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Гранта РФФИ № 18-19-00589.

Литература

1. R. Hollerweger, H. Riedl, J. Paulitsch, M. Arndt, R. Rachbauer, P. Polcik, S. Primig, P.H. Maryfhoer // *Surf. Coat. Technol.* (2014) 257: 78–86.
2. M. Mikula, M. Truchlý, D.G. Sangiovanni, D. Plasienka, T. Roch, M. Gregor, P. Durina, M. Janik, P. Kús // *J. Vac. Sci Technol. A* (2017) 35: 060602.