ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/132

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ
АТОМОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ Ti-Al-N НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ПОЛУЧАЕМОГО ПОКРЫТИЯ**

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

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

²*Томский государственный университет, Томск*

Превосходные характеристики покрытий на основе системы Ti-Al-N обеспечили их широкое промышленное применение, что вызывает повышенный интерес к исследованию закономерностей формирования данных покрытий и возможностей дальнейшего улучшения их механических и физических свойств. Известно, что повышенные твердость и износостойкость данных покрытий обусловлены тем, что вследствие высоконеравновесных условий осаждения в них формируется метастабильный пересыщенный твердый раствор $Ti_{1-x}Al_xN$. В неравновесных условиях алюминий частично замещает титан в кристаллической решетке TiN, формируя метастабильную ГЦК структуру. Поскольку Al обладает меньшим ионным радиусом, чем титан, то его введение способствует уменьшению параметра решетки покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$, что приводит к упругой дисторсии кристаллической решетки и, как следствие, к твердорастворному упрочнению материала покрытия [1]. Дополнительного повышения твердости покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$ можно добиться путем их отжига в инертной атмосфере или в вакууме в диапазоне температур от 700 до 950 °C [2]. Однако при температурах отжига свыше 900-950 °C метастабильные домены c-AlN с ГЦК структурой трансформируются в стабильную фазу w-AlN (вюрцит), которая характеризуется ГПУ структурой, что вызывает резкое снижение твердости и износостойкости покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$. Дальнейшее развитие технологий обработки материалов требует повышения рабочих температур износостойких защитных покрытий до 1000 °C и выше. Поэтому в последнее время ведутся интенсивные исследования, направленные на поиск способов улучшения характеристик покрытий на основе системы Ti-Al-N.

В настоящей работе с использованием методов расчетов из первых принципов и молекулярной динамики проведено исследование механических свойств покрытий на основе системы Ti-Al-N, в которой варьируется расположение атомов Al в решетке TiN. Проведены расчеты полных энергий и энтальпий смешения твердых растворов $Ti_{1-x}Al_xN$ в зависимости от концентрации x и конфигурационного упорядочения атомов алюминия в рамках теории функционала электронной плотности. На основе полученных результатов построены молекулярно-динамические модели покрытий с различным конфигурационным упорядочением атомов алюминия и проведены расчеты по одноосному растяжению кристаллитов титана с нанесенными покрытиями различного типа и толщины. Проанализировано влияние типа конфигурационного упорядочения атомов алюминия в решетке TiN на прочностные свойства и характер разрушения получаемого покрытия. Результаты компьютерного моделирования сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что наилучшие прочностные характеристики демонстрирует покрытие на основе системы Ti-Al-N со случайным распределением атомов алюминия в кристаллической решетке TiN.

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

1. O. Knotek, F. Löffler, G. Kramer Multicomponent and multilayer physically vapor deposited coatings for cutting tools // Surface and Coating Technology – 1992. – V. 54-55. – P. 241-248.
2. M. Stueber, H. Holleck, H. Leiste, K. Seeman, S. Ulrich, C. Ziebert Concepts for the design of advanced nanoscale PVD multilayer protective thin films // Journal of Alloys and Compounds – 2009. – V. 483. – P. 321-333.