ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика.

**Материалы с многоуровневой иерархически
организованной структурой и интеллектуальные
производственные технологии»,**

**посвященная 90-летию со дня рождения
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН
академика Виктора Евгеньевича Панина**

в рамках

**Международного междисциплинарного симпозиума
«Иерархические материалы: разработка и приложения
для новых технологий и надежных конструкций»**

**5–9 октября 2020 года
Томск, Россия**

Томск
Издательство ТГУ
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/115

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ПОКРЫТИЙ TiAlTaN НА ТИТАНОВОЙ ПОДЛОЖКЕ

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

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

На сегодняшний день наряду с модификацией поверхностного слоя основным способом повышения эффективности эксплуатации и долговечности материалов и изделий на их основе, используемых в современной промышленности, является нанесение различных износостойких защитных покрытий. Для получения таких защитных покрытий используется большое число материалов, среди которых можно выделить группу покрытий на основе нитридов переходных металлов, в особенности системы Ti-Al-N [1]. Добавление Al в покрытия TiN позволяет резко увеличить их стойкость к окислению, а также обеспечивает сохранение высоких значений твердости и износостойкости при повышенных температурах [2]. Введение в состав данных покрытий дополнительных элементов, то есть переход к системам, содержащим 4, 5 и более компонентов, открывает широкие перспективы дальнейшего повышения их твердости, износостойкости, термической стабильности, стойкости к окислению, снижения коэффициента трения и др. [3, 4]. Согласно последним исследованиям Ta является одной из наиболее перспективных легирующих добавок в покрытия Ti1-xAlxN, поскольку его введение позволяет не только увеличить твердость и трещиностойкость таких покрытий, но и существенно повысить температуру их спинодального распада, что обеспечивает сохранение их высокой твердости и износостойкости при повышенных температурах. Однако свойства подобных многокомпонентных покрытий сильно зависят от небольших изменений относительного содержания в них химических элементов [3, 4], что делает практически невыполнимой задачу экспериментального подбора оптимального химического состава. Эффективным способом решения данной проблемы является использование методов теоретического расчета на основе первых принципов в сочетании с атомистическим моделированием методом молекулярной динамики (МД). В настоящей работе с использованием данных, полученных на основе расчетов из первых принципов, проведено молекулярно-динамическое исследование механических свойств покрытий на основе системы Ti-Al-Ta-N, в которых варьируется расположение атомов Al и Ta в решетке TiN. Проанализировано влияние типа конфигурационного упорядочения атомов на прочностные свойства и характер разрушения получаемого покрытия. МД исследования включают одноосное растяжение и скретч-тестирование покрытия жестким индентором. Результаты компьютерного моделирования сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными.

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

1. Holleck H. Material selection for hard coatings // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1986. – V. 4. – No. 6. – P. 2661-2669.
2. PalDey S., Deevi S.C. Single layer and multilayer wear resistant coatings of (Ti,Al)N: a review // Mater. Sci. Eng. A. – 2003. – V. 342. – P. 58-79.
3. Mayrhofer P.H., Rachbauer R., Holec D., Rovere F., Schneider J.M. Protective Transition Metal Nitride Coatings // In: Comprehensive Materials Processing. Elsevier Ltd, 2014. pp. 355-388.
4. Yang Y., Xu Y.X., Chen L., Mayrhofer P.H. Improved Ti-Al-N coatings through Ta alloying and multilayer architecture // Surf. Coat. Technol. – 2017. – V. 328. – P. 428-435.