

УДК 620.3

Влияние состава и толщины нанопокровтий типа TiAlN на прочность их связи с железом: квантово-химический анализ

Ю.Ф. Мигаль, И.В. Колесников

Ростовский государственный университет путей сообщения (РГУПС),
пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, д. 2, г. Ростов-на-Дону 344038, Россия

Поступила в редакцию 18.05.2022.

После доработки 22.08.2022.

Принята к публикации 22.08.2022.

С помощью методов квантовой химии исследованы атомные структуры, возникающие при вакуумном нанесении нанопокровтий состава TiAlN на поверхность железа. Рассмотрены эффекты, проявляющиеся при нанесении первых атомных слоёв таких покровтий. Проведены расчёты прочности связи подобных покровтий с поверхностью. В рамках используемой в работе модели показано, что наиболее прочным является вариант покровтия, нижний слой которого состоит из атомов Ti, находящихся непосредственно на поверхности железа. Вышележащие слои состоят из смеси атомов Ti, Al и N. Прочность связи такого покровтия с железом может возрасти на 13% по сравнению с ее минимальным значением. При моделировании взаимодействия покровтия с подложкой установлено, что прочность связи между компонентами практически не зависит от толщины подложки, если подложка состоит из трех или более слоев атомов железа. Этот факт свидетельствует о короткодействующем характере межатомных сил на границе покровтие-подложка, что существенно упрощает теоретический анализ прочностных свойств подобных систем. В работе показано, что при расчете атомных конфигураций, возникающих на поверхности железа при вакуумном осаждении, следует отыскивать конфигурации с минимальной энергией. Именно такие конфигурации с наибольшей вероятностью образуются на поверхности подложки. Традиционные способы исследования атомных структур, основанные на принципе минимальной энтальпии системы, в этой ситуации не применимы. В работе полученные результаты сопоставлены с известными экспериментальными данными, относящимися к подобным объектам.

Ключевые слова: нанопокровтие, толщина покровтия, механическая прочность, прочность химической связи, квантово-химический анализ, атомные структуры, адгезионное взаимодействие, межатомные взаимодействия, состав атомных слоев, вакуумное осаждение, принцип минимума энергии системы.

DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

Адрес для переписки:

Ю.Ф. Мигаль
Ростовский государственный университет путей сообщения
(РГУПС),
пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, д. 2,
г. Ростов-на-Дону 344038, Россия
e-mail: ymigal@mail.ru

Address for correspondence:

Yu.F. Migal
Rostov State Transport University,
Rostovskogo Strelkovogo Polka Narodnogo Opolcheniya sq., 2,
Rostov-on-Don 344038, Russia
e-mail: ymigal@mail.ru

Для цитирования:

Ю.Ф. Мигаль, И.В. Колесников.
Влияние состава и толщины нанопокровтий типа TiAlN на
прочность их связи с железом: квантово-химический анализ.
Трение и износ.
2022. – Т. 43, № 4. – С. 433–442.
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

For citation:

Yu.F. Migal and I.V. Kolesnikov.
[Influence of the Composition and Thickness of TiAlN-Type
Nanocoats on the Strength of Their Bond with Iron: Quantum
Chemical Analysis].
Trenie i Iznos.
2022, vol. 43, no. 4, pp. 433–442 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

Influence of the Composition and Thickness of TiAlN-Type Nanocoats on the Strength of Their Bond with Iron: Quantum Chemical Analysis

Yu.F. Migal and I.V. Kolesnikov

Rostov State Transport University,
Rostovskogo Strelkovogo Polka Narodnogo Opolcheniya sq., 2, Rostov-on-Don 344038, Russia

Received 18.05.2022.

Revised 22.08.2022.

Accepted 22.08.2022.

Abstract

Atomic structures arising from the vacuum deposition of TiAlN nanocoats on the iron surface have been studied using quantum chemistry methods. The effects arising from the application of the first atomic layers of such coatings are considered. Calculations of the adhesion strength of such coatings to the surface were carried out. Within the framework of the model used in the work, it is shown that the most durable is the coating variant, the lower layer of which consists of Ti atoms located directly on the surface of iron. The overlying layers in this coating consist of a mixture of Ti, Al and N atoms. The adhesion strength of such a coating with iron increases by 13% compared to its minimum value. When modeling the interaction of the coating with the substrate, it was found that the bond strength between these components practically does not depend on the thickness of the substrate if the substrate consists of three or more layers of atoms that make up the iron crystal lattice. This fact indicates the short-term nature of interatomic forces at the coating-substrate interface and greatly simplifies the theoretical analysis of the strength properties of such systems. The article shows that when calculating atomic configurations arising on the jelly surface during vacuum deposition, it is necessary to look for configurations with minimal energy. It is precisely such configurations that are most likely to form on the surface of the substrate. Traditional methods of studying atomic structures based on the principle of minimum enthalpy of the system are not applicable in this situation. The article compares the results obtained with known experimental data related to similar objects.

Keywords: nanocoating, coating thickness, mechanical strength, chemical bond strength, quantum chemical analysis, atomic structures, adhesive interaction, interatomic interactions, composition of atomic layers, vacuum deposition, the principle of minimum energy of the system.

DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

Адрес для переписки:

Ю.Ф. Мигаль
Ростовский государственный университет путей сообщения
(РГУПС),
пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, д. 2,
г. Ростов-на-Дону, 344038, Россия
e-mail: ymigal@mail.ru

Address for correspondence:

Yu.F. Migal
Rostov State Transport University,
Rostovskogo Strelkovogo Polka Narodnogo Opolcheniya sq., 2,
Rostov-on-Don 344038, Russia
e-mail: ymigal@mail.ru

Для цитирования:

Ю.Ф. Мигаль, И.В. Колесников.
Влияние состава и толщины нанопокрyтий типа TiAlN на
прочность их связи с железом: квантово-химический анализ.
Трение и износ.
2022. – Т. 43, № 4. – С. 433–442.
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

For citation:

Yu.F. Migal and I.V. Kolesnikov.
[Influence of the Composition and Thickness of TiAlN-Type
Nanocoats on the Strength of Their Bond with Iron: Quantum
Chemical Analysis].
Trenie i Iznos.
2022, vol. 43, no. 4, pp. 433–442 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-4-433-442

Список использованных источников / References

1. **Das S., Guha S., Ghadai R., Kumar D., and Swain B.P.** Structural and Mechanical Properties of CVD Deposited Titanium Aluminium Nitride (TiAlN) Thin Films // *Appl. Phys.* — 2017 (**A123**), 412. <https://doi.org/10.1007/s00339-017-1032-0>
2. **Xing Xu, Fenghua Su, and Zhujun Li.** Tribological Properties of Nanostructured TiAlN/W₂N Multilayer Coating Produced by PVD // *Wear.* — 2019 (**430-431**), 67—75. DOI: 10.1016/j.wear.2019.04.021
3. **Komarov F.F., Konstantinov S.V., and Pilko V.V.** Formation of Nanostructured TiAlN, TiCrN, and TiSiN Coatings Using Reactive Magnetron Sputtering // *Journal of Friction and Wear.* — 2014 (**35**), 215—223. DOI: 10.3103/S1068366614030064
4. **Vereschaka A., Kataeva E., Sitnikov N., Aksenenko A., Oganyan G., and Sotova C.** Influence of Thickness of Multilayered Nano-Structured Coatings Ti-TiN-(TiCrAl)N and Zr-ZrN-(ZrCrNbAl)N on Tool Life of Metal Cutting Tools at Various Cutting Speeds // *Coatings.* — 2018 (**8**), 44. <https://doi.org/10.3390/coatings8010044>
5. **Berkovich E.S.** Three-Faceted Diamond Pyramid for Micro-Hardness Testing // *Industrial Diamond Review.* — 1951 (**11**), no. 127, 129—132
6. **Jakes J.E.** Improved Methods for Nanoindentation Berkovich Probe Calibrations Using Fused Silica // *J. Mater. Sci.* — 2018, (**53**), 4814—4827. <https://doi.org/10.1007/s10853-017-1922-8>
7. **Shugurov A.R., Akulinkin A.A., Panin A.V., Sergeev V.P., Kalashnikov M.P., Voronov A.V., and Cheng C.-H.** Study of Crack Resistance of TiAlN Coatings by Scratch Testing // *Physical Mesomechanics.* — 2017 (**20**), 185—192; DOI: 10.1134/S1029959917020084
8. **Music D., Geyer R.W., and Schneider J.M.** Recent Progress and New Directions in Density Functional Theory Based Design of Hard Coatings // *Surf. Coat. Technol.* — 2016 (**286**), 178—190. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2015.12.021
9. **Migal Yu.F., Kolesnikov V.I., and Shishiyanu D.N.** Computer Simulation of TiAlN Coatings and Its Analogues on Iron Surface // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* — 2021 (**1029**) 012057. DOI: 10.1088/1757-899X/1029/1/012057
10. **Migal Yu.F.** DFT-Study of Strength of TiAlN Coating on Iron Surface // *PHENMA 2021: Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications.* — 2021, 207—214. DOI: 10.1007/978-3-030-76481-4_18
11. **te Velde G., Bickelhaupt F.M., van Gisbergen S.J.A., Fonseca Guerra C., Baerends E.J., Snijders J.G., and Ziegler T.** Chemistry with ADF // *J. of Computational Chemistry.* — 2001 (**22**), no. 9, 931—967. <http://dx.doi.org/10.1002/jcc.1056>
12. **Shum P.W., Li K.Y., and Shen Y.G.** Improvement of High-Speed Turning Performance of Ti-Al-N Coatings by Using a Pretreatment of High-Energy Ion Implantation // *Surface and Coatings Technology.* — 2005 (**198**), 414—419. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2004.10.109
13. **Cartney J.M., Harris S.G., Munroe P.R., and Doyle E.D.** Transmission Electron Microscopy of TiN and TiAlN Thin Films Using Specimens Prepared by Focused Ion Beam Milling // *Surface and Coatings Technology.* — 2004 (**183**), 239—246. DOI: 10.1016/J.SURFCOAT.2003.09.058
14. **Shugurov A.R., Akulinkin A.A., Panin A.V., Perevalova O.B., and Sergeev V.P.** Structural Modification of TiAlN Coatings by Preliminary Ti Ion Bombardment of a Steel Substrate // *Technical Physics.* — 2016 (**61**), no. 3, 409—415; DOI: 10.1134/S1063784216030191
15. **Kolesnikov V.I., Kudryakov O.V., Varavka V.N., Manturov D.S., and Novikov E.S.** Effect of the Adhesive Properties of Vacuum Ion-Plasma TiAlN Coatings and Wear Resistance in Friction // *Journal of Friction and Wear* — 2021 (**42**), № 5, 317—326. DOI: 10.3103/S106836662105007X

Для приобретения полного текста статьи, обращайтесь в редакцию журнала.
Адрес редакции: 246050, ул. Кирова 32а, г. Гомель, Беларусь. Телефон/факс: +375 (232) 34 06 36 / 34 17 11
Full text of articles can be purchased from the editorial office.
Address: 32a Kirov Street, Gomel, Belarus, 246050. Phone: +375 (232) 34 06 36. Fax: +375 (232) 34 17 11
E-mail: FWJ@tut.by