

УДК 621

Ю.Г. Кабалдин, С.В. Серый, Е.А. Симагина, А.В. Уткин

## ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВОВ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНЫХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ РЕЖУЩЕГО ИНСТРУМЕНТА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Приведены теоретические и экспериментальные исследования ряда составов наноструктурных покрытий.

*Ключевые слова:* наноструктурные покрытия, оптимизация составов, метод потенциала электронной плотности.

Работоспособность металлорежущего инструмента в автоматизированном производстве существенно влияет на качество обрабатываемой поверхности за счет изменения контактных условий в зоне резания, повышение стабильности процесса резания, а также на производительность обработки за счет сокращения времени резания на замену режущего инструмента.

В настоящей статье изложены результаты теоретических исследований и производственных испытаний режущих сменных многогранных неперетачиваемых пластин (СНП), организованных с целью оценки работоспособности режущего инструмента с различными видами наноструктурных покрытий. Научный подход к исследованию такого вида покрытий в настоящее время отсутствует.

Испытания проводились в условиях действующего производства. Были испытаны СНП формы TNMG 220408 из сплава ВК8, производства «Кировоградский завод твёрдых сплавов», с различным видами наноструктурных покрытий (пять видов), нанесённых для испытания в вакуумной установке для магнетронного плазменного распыления UniCoat 700 НПФ. В табл. 1 приведены результаты испытания пластин с покрытиями.

Таблица 1

Характеристики покрытий

| № п/п | № опыта  | Тип покрытия  | Цвет покрытия     | $a$ , мкм | $H$ , ГПа | $E^*$ , ГПа | $H/E$ | $nIT$ , % | $HV$ | Адгезия |
|-------|----------|---------------|-------------------|-----------|-----------|-------------|-------|-----------|------|---------|
| 1     | 48к АТ   | AlTiN         | Серый             | 3,1       | 44        | 367         | 0,127 | 75        | 4125 | HF1     |
| 2     | 54к АТ-Т | AlTiN- TiN ml | Радужный          | 3,0       | 39        | 326         | 0,127 | 74        | 3686 | HF1     |
| 3     | 84к АХ   | AlCrN         | Светло-серый      | 3,5       | 42        | 363         | 0,122 | 73        | 3931 | HF1     |
| 4     | 57к АТ-Т | AlTiN-TiN ml  | Радужный          | 3,5       | 41        | 369         | 0,118 | 71        | 3851 | HF1     |
| 5     | 6к АТ    | (Ti,C)N       | Светло-коричневый | 3,0       | 42        | 317         | 0,14  | 78        | 3932 | HF1     |

*Примечание:*  $a$  – расчётная толщина;  $nIT$  – инденторная твёрдость;  $E^*=E/(1-\nu^2)$ ; ГПа – приведённый модуль упругости (где  $E$  – модуль Юнга,  $\nu=0,25$  – коэффициент Пуассона),  $HV$  – микротвёрдость по Виккерсу;  $nIT$ , % - доля работы упругой деформации (упругое восстановление).

Механические характеристики покрытия (табл. 1) оценивались методом наноиндентации образца-свидетеля в соответствии с DIN EN ISO 14577-1 с использованием системы

FISHERSKOPE ®Н100С. Адгезия покрытия к основе оценивалась по адгезионному тесту Роквелла (стандарт VDI-3198): индентации образца-свидетеля с покрытием на твердомере Роквелла под нагрузкой 150 кгс и последующей визуальной оценкой результата индентации по 6-балльной шкале. Балл HF1 соответствует наивысшей адгезионной прочности.

Испытания образцов при резании проводились на операции токарной обработки детали 31029-1701040 – «Крышка первичного вала» (материал СЧ18 ГОСТ1412-85 – отливка 143-229 НВ) (табл. 2).

Таблица 2

Данные об операции токарной обработки

| № п/п | Операция                  | 05-токарная                  |
|-------|---------------------------|------------------------------|
| 1     | Обработка                 | получистовая с ЧПУ           |
| 2     | Оборудование              | Станок токарный с ЧПУ СВ-141 |
| 3     | СОЖ                       | АТМ СОЖ                      |
| 4     | Обрабатываемый размер     | d116/d82                     |
| 5     | Частота вращения шпинделя | n=380 об/мин                 |
| 6     | Скорость резания          | V=100-130 м/мин              |
| 7     | Глубина резания           | a=0,5-1 мм                   |
| 8     | Длина обработки           | Lобр=32 мм                   |
| 9     | Минутная подача           | Sм=57 мм/мин                 |
| 10    | Время резания             | Tрез=0,56 мин                |

Испытания проводились по действующей методике М 37.102.0022. В процессе испытания фиксировалась величина фактической стойкости и износа СНП. Смена изношенных граней СНП производилась по технологическому критерию (при несоответствии обработанной поверхности заданным параметрам точности и шероховатости). После окончания испытаний проводилась статистическая обработка полученных результатов.

Стойкость СНП при обработке СЧ18

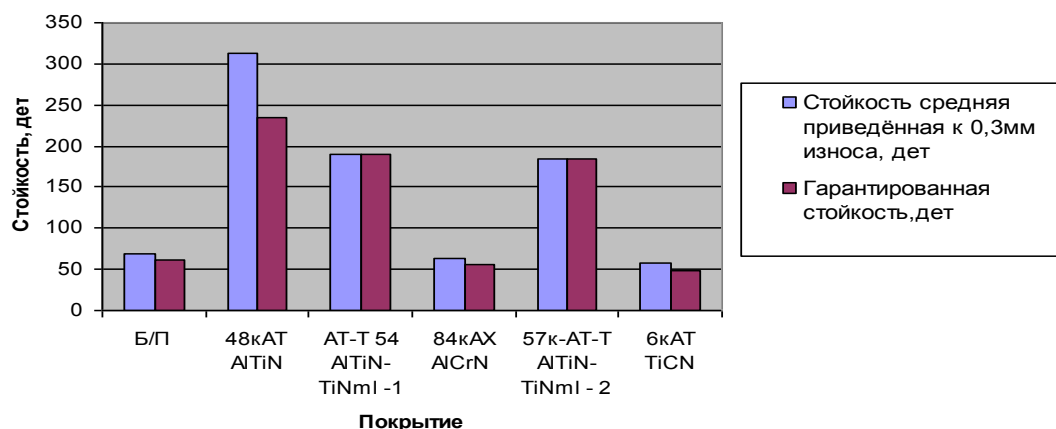


Рис. 1. Гистограмма, иллюстрирующая стойкость СНП с различными видами наноструктурных покрытий при обработке СЧ18

Оценка работоспособности СНП с различными покрытиями осуществлялась на основе сравнения их стойкости со стойкостью СНП без покрытия (рис. 1). Коэффициент стойкости СНП без покрытия принят равным 1. Из рис. 1 видно, что наибольшую работоспособность проявляет покрытие АТiN. Этот вывод вытекает и из анализа табл. 3.

В табл. 3 приведены результаты математической обработки испытуемого инструмента с наноструктурными покрытиями.

Таблица 3

### Результаты испытания вариантов покрытий

| № п/п | Покрытие     | Количество опытов | Средняя приведённая стойкость, дет./грань | Гарантированная стойкость, дет./грань | Коэффициент стойкости (по сравнению с непокрытым образцом) | Коэффициент вариации средней приведённой стойкости |
|-------|--------------|-------------------|---|---------------------------------------|--|--|
| -     | Без покрытия | 9                 | 69  | 61                                    | 1,00   | 0,09   |
| 1     | AlTiN        | 9                 | 312                                       | 234                                   | 4,54   | 0,20   |
| 2     | AlTiN-TiNml1 | 9                 | 189                                       | 145                                   | 2,75   | 0,18   |
| 3     | AlCrN        | 9                 | 64  | 55                                    | 0,92   | 0,10   |
| 4     | AlTiN-TiNml2 | 9                 | 185                                       | 161                                   | 2,68   | 0,10   |
| 5     | (Ti,C)N      | 9                 | 58  | 48                                    | 0,84   | 0,13   |

Таким образом, наилучшая работоспособность показал режущий инструмент с покрытием AlTiN. В связи с этим, в процессе дальнейшей работы были проведены электронно-микроскопические исследования и математическое моделирование составов покрытий методом функционала электронной плотности.

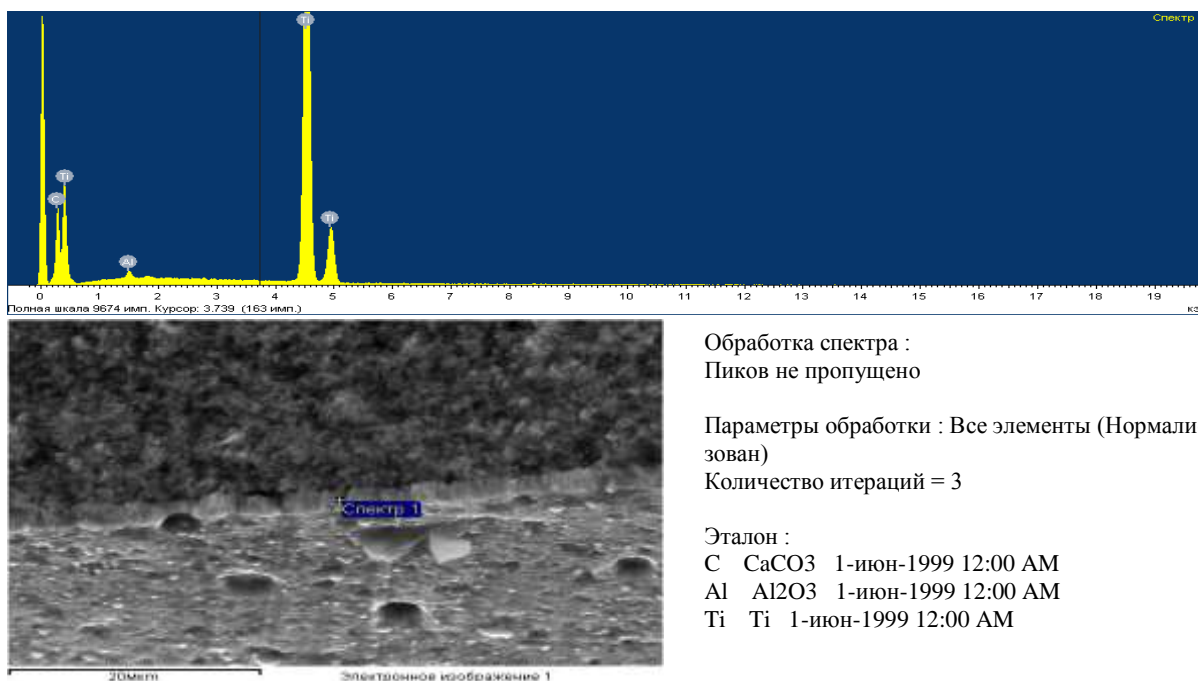
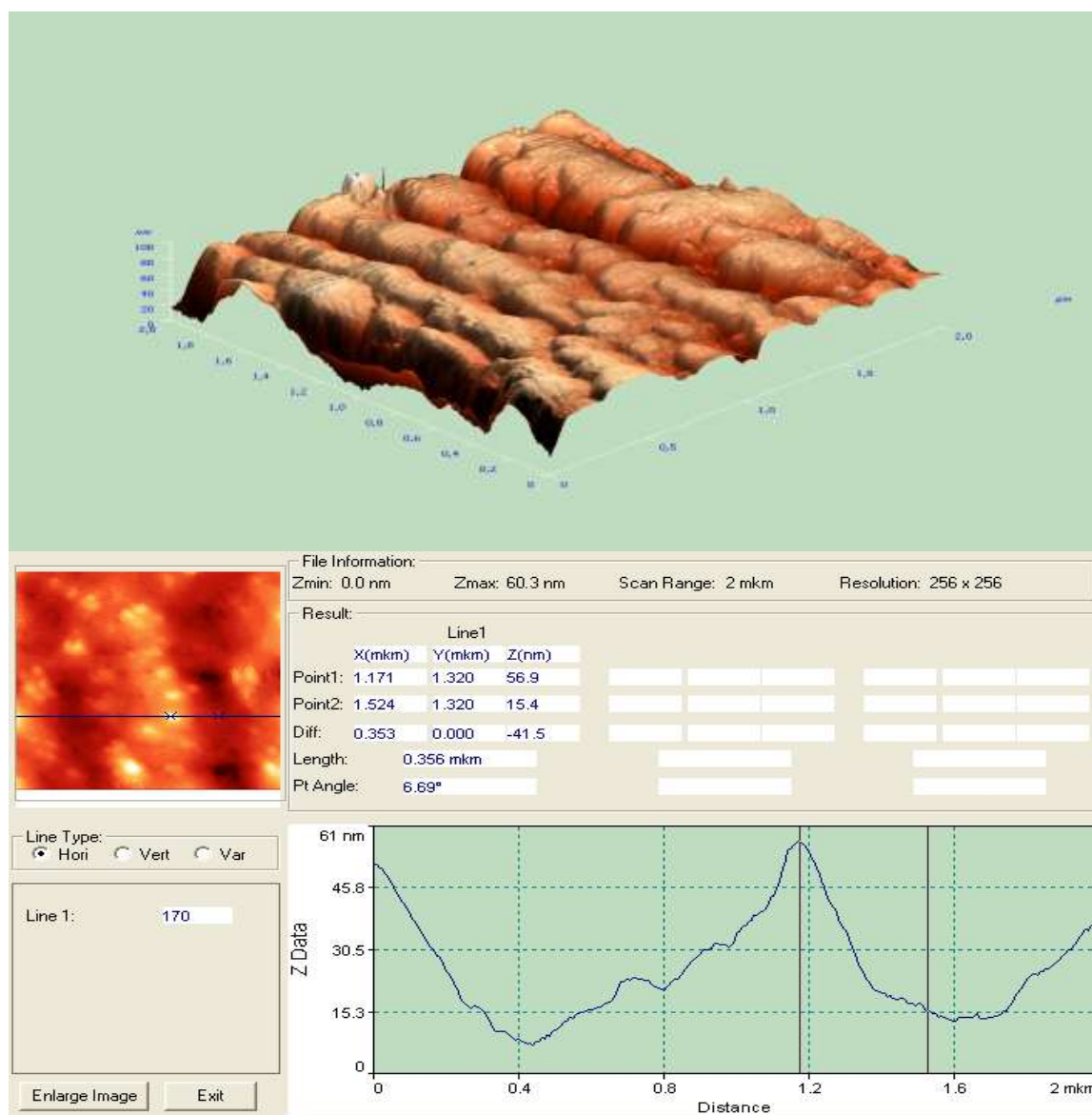


Рис. 2. Результаты микрорентгеноспектрального анализа покрытия AlTiN по толщине

Электронно-микроскопические исследования выполняли на растровом и атомном силовом микроскопах. На рис. 2 приведена электронная микрофотография с микрорентгеноспектральным анализом структуры покрытия по его толщине, которая составляла ~ 3,1 мкм.

На рис. 3 представлена электронная микрофотография структуры покрытия AlTiN, выполненная на атомном силовом микроскопе (АСМ), где приведены расчеты размеров зерен покрытия.

При разработке наноструктур с заданными функциональными свойствами путём моделирования атомной сборки необходимо учитывать положение и свойства каждого атома. Эта задача сейчас успешно решается путём квантово-механического математического моделирования из первых принципов (*ab initio*).



| №  | Средняя высота зерен |
|----|----------------------|
| 9  | 60,7412 ±14,5567 nm  |
| 10 | 87,5158 ±21,9893 nm  |
| 11 | 69,4618 ±15,3346 nm  |

Рис. 3. Результаты исследований покрытия AlTiN на атомном силовом микроскопе

Если в традиционных металлических материалах положение атомов в узлах кристаллической решётки определено, т.е. существует обычная повторяемость или простая трансляция элементарной ячейки, то в сложной наноструктуре и на границе наноструктур (как в случае с покрытиями) организацию атомов сложно задавать. Поэтому возникает вопрос: каковы принципы организации взаимодействий последовательностей расположения атомов в наноструктуре и её форма для обеспечения заданных функциональных свойств [2]?

Существует ряд методов оптимизации пространственной организации наноструктур

при расчёте минимума энергии межатомных связей в структуре. Однако в силу указанных требований, т.е. необходимость точного определения выгодного, с точки зрения энергетического состояния, координат каждого атома, существующие программные продукты оказываются достаточно эффективными при первопринципном математическом моделировании сборки наноструктур достаточно большого порядка ( $10^2$ - $10^3$  атомов). Кроме того, в силу прогресса в вычислительной технике и распараллеливании вычислений, становится возможным на основе расчёта множеств эффективных энергетических состояний (атомарных конфигураций с минимальной энергией) прогнозировать функциональные свойства наноструктур. В связи с этим, предлагаются новые подходы к прогнозированию функциональных свойств наноструктур и их дальнейшему эмпирическому обоснованию.

Разработаны и численно реализованы эффективные методы моделирования сложных наноструктур на основе теории функционала электронной плотности (ТФП, англ. DFT). Согласно ТФП [3], все электронные свойства системы, включая энергию, могут быть получены из электронной плотности (без знания волновых функций).

В программном коде программного комплекса *ab-initio* расчетов FHI (*fhi96md*, *fhi98md*) используется реализация ТФП на основе метода псевдопотенциала, позволяющего заменить часть базисных функций на некоторый эффективный потенциал. Такая замена производится автоматически при расчёте. От пользователя требуется выбрать псевдопотенциал требуемого типа. В работе используются псевдопотенциалы, предлагаемые по умолчанию в пакете FHI98pseudo.

В работе ставилась цель – провести *ab-initio* исследования применительно не только к однородному материалу, а к нанопокрыванию, а также исследовать прочностные свойства и затем эмпирически убедиться в достоверности расчетов. В связи с этим, проведены расчеты покрытий на основе AlTiN при взаимодействии с твердосплавной режущей пластинки из WC/Co (зерна карбида вольфрама в кобальтовой связке взаимодействуют с алюминием и титаном).

Теоретические расчеты также основаны на теории функционала электронной плотности (DFT) [3] в приближении обобщенного градиента (GGA), совмещенного с методом псевдопотенциалов, и базисе плоских волн. Для расчетов использовался программный пакет FHI96md, позволяющий оптимизировать атомную конфигурацию системы и находить ее полную энергию. Данный пакет представляет собой эффективный инструмент для проведения полноэнергетических расчетов многоатомных систем (молекулы, кристаллы, дефекты, поверхности) для широкого класса материалов

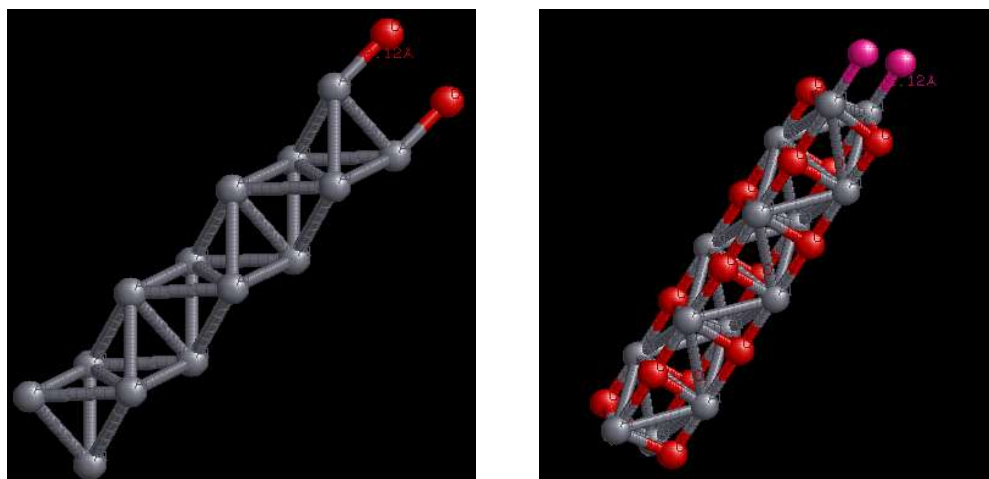
Псевдопотенциалы для алюминия, кобальта и углерода были сконструированы по схеме Труллера-Мартинса. Для вольфрама s- и p-компоненты находились по методике Хамана [7], а d-компонента – по схеме Труллера-Мартинса. В качестве базиса были выбраны плоские волны, энергия обрезания в расчетах составила 40 ридберг. В качестве k-точки использовалась  $\Gamma$ -точка зоны Бриллюэна. Для вычисления обменной и корреляционной энергии использовалось градиентное приближение в форме, предложенной Педью и Вэнгом.

Псевдопотенциалы вычислялись с помощью пакета FHI98pp, они были испытаны на отсутствие ложных состояний (ghost states) и проверены на способность воспроизвести основные решеточные характеристики объемных материалов (постоянную решетки и модуль упругости), получены распределения электронной плотности состояний и СТМ-изображения поверхностей наноструктур (рис. 4 и рис. 5).

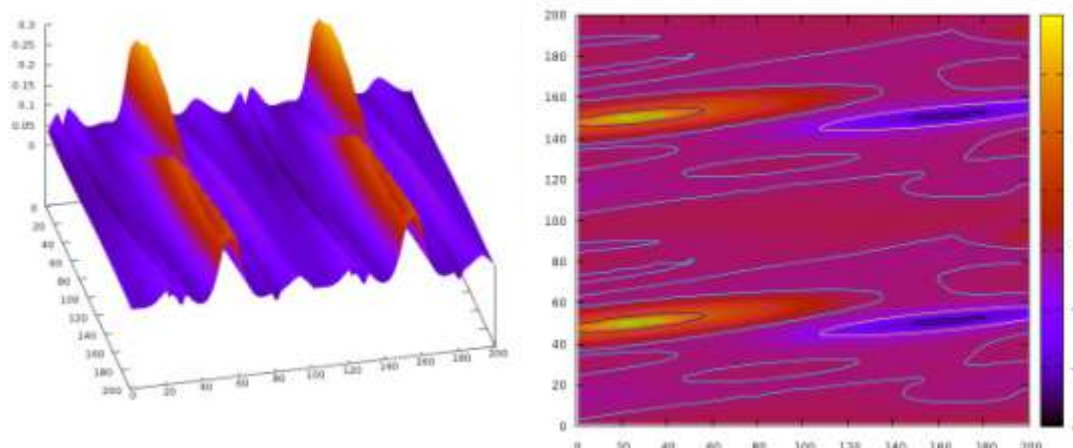
Вычисления показывают, что функциональные свойства результирующей электронной структуры зависят от следующих взаимодействий: на границе Co и Al, границе WC и Al, а также Co и Ti и WC с Ti.

Наилучшие результаты при расчетах достигнуты при поиске минимума энергии Co и Al, в том случае обеспечивается наибольшая сходимость расчетов электронной структуры. При расчете взаимодействий карбида вольфрама с алюминием (граница WC и Al) при переборе возможных пространственных атомарных конфигураций сходимости не достигнуто.

Таким образом, прочность нанесенного покрытия обеспечивается связями Co и Al, а не WC и Al, т.е. нанопокрывтие взаимодействует с кобальтовой связкой твердосплавной пластинки, а не с зернами карбида вольфрама.



**Рис. 4. Моделирование взаимодействий нанопокрывтия с компонентами твердосплавной подложки механообрабатывающего инструмента: Co и Al(слева), WC и Al (справа)**



**Рис. 5. Распределение электронной плотности состояния моделируемой наноструктур: по 2 атома в каждой элементарной ячейке (слева), моделирование STM- изображения поверхности наноструктуры - STM simulation (справа)**

В табл. 4 приведены расчеты  $E_{\text{п}}$  общей энергии в рассматриваемых системах.

**Таблица 4**

| Система             | WC-Al | WC-Ti | Co-Al | Co-Ti | Al-Fe |
|---------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $E_{\text{п}}$ , эВ | -     | -     | 18,48 | 33,85 | 34,45 |

Известно, что химические связи между атомами устанавливаются путем перекрытия электронных орбиталей и стягиванием ядер атомов [1]. Из табл. 4 следует, что между карбидом вольфрама и атомами Al и Ti связь отсутствует. Химическая связь кобальта с алюминием более устойчива, чем кобальта с титаном, имеющим большую общую энергию. Расчеты показывают, что связь алюминия с железом также имеют большую энергию, чем Co – Al, что обеспечивает устойчивость покрытий на инструменте.

Приведенные квантово-механические расчеты требуют мощной вычислительной техники и времени. В связи с этим, также проводилось исследование эффективности распараллеливания квантово-механических расчетов (рис. 6), что сокращало время расчетов.

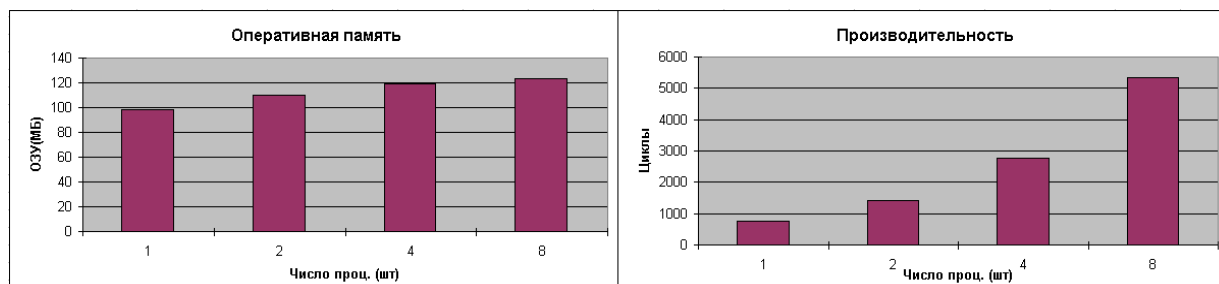


Рис. 6. Тестовое распараллеливание *ab-initio* расчетов (ПК на основе Intel i7, 8 ядер)

Получая достоверные экспериментальные данные, используя современные численные квантово-механические методы и эффективное распараллеливание, в дальнейшем требуется численно провести моделирование для постановок задач с многослойными нанопокрывтиями путем более сложных *ab-initio* расчетов на основе ТФП.

#### Библиографический список

1. **Кабалдин, Ю.Г.** Информационные модели наносборки наносистем и наноструктурирования материалов при внешнем механическом воздействии / Ю.Г. Кабалдин [и др.]. – Комсомольск – на – Амуре: КнАГТУ, 2009. – 212 с.
2. **Уолвертон, М.** Большая проблема малого // В мире науки и техники. 2009. №2. С. 14.
3. P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864, 1964.
4. F. Birch, J. Geophys. Res. 83, 1257, 1978.
5. M. J. Mehl, J. E. Osburn, D. A. Papaconstantopoulos, and B. M. Klein, Phys. Rev. B 41, 10311, 1990.
6. Jochen M. Schneider. Effect of transition metal additives on electronic structure and elastic properties of TiAl and Ti3Al. Phys. Rev. B 74, 174110, 2006.
7. D.R. Hamann. Phys. Rev. B 40, 2980 (1989).

Дата поступления  
в редакцию 08.04.2011

Y.G. Kabaldin, S. V. Seryi, E.A. Simagina, A.V. Utkin

#### OPTIMIZATION OF COMPOSITION AND FUNCTIONAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED COATINGS FOR CUTTING TOOLS USING THE DENSITY FUNCTIONAL

The article presents the results of theoretical and experimental studies several formulations of nanostructured coatings.

*Key words:* nanostructured coatings, optimization of the compositions, method of building the electronic density.