УДК 621.9.026

Ю.Г. Кабалдин¹, О.В. Кретинин¹, С.В. Серый², Д.А. Шатагин¹

НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ КОНТАКТНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ТВЕРДОСПЛАВНОГО ИНСТРУМЕНТА ПРИ РЕЗАНИИ

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева¹, Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет²

Изучен процесс наноструктурирования контактных поверхностей режущего инструмента при механической обработке. Указаны принципы формирования износостойких наноструктурных покрытий для твёрдосплавного инструмента.

Ключевые слова: твёрдые сплавы, износ, наноструктурные покрытия.

Согласно современным воззрениям [1, 2], сопротивляемость инструментальных материалов разрушению и изнашиванию существенно определяется как исходной структурой, так и динамической, которая формируется в процессе нагружения и вызывает диссипацию подводимой энергии.

Развитие представлений о прочности и механизмах изнашивания режущего инструмента в значительной степени определяется новейшими достижениями в области материаловедения, физики и химии твердых тел. Сложность физико-химических процессов, протекающих на контактных поверхностях инструмента, недоступность зоны резания обусловливает также необходимость адекватного моделирования указанных процессов и разработку методов расчета прочности и износостойкость режущего инструмента.

В последние годы резко возрос интерес к наноматериалам и нанотехнологиям [3, 4]. При переходе к нанометровым размерам материалы начинают менять свои фундаментальные свойства. Это происходит из-за изменения соотношения поверхностных и объемных атомов индивидуальных частиц. Поверхность самого идеального кристалла может считаться большим двумерным дефектом (на поверхности атомы с одной стороны ничем не связаны). Поверхностные атомы в общем случае находятся на более близких расстояниях друг от друга, чем атомы в объеме кристаллической решетки, и обладают повышенным запасом энергии. До определенного размера частиц доля этих атомов мала, их вкладом в общие характеристики вещества можно пренебречь. У наночастицы проявляют квантовые свойства в отношении своих размеров. Это означает, что в определенном материале могут устойчиво существовать наночастицы только определенных размеров ~ 100 нм.

В настоящее время в качестве инструментальных материалов широко используются твердые сплавы и твердые сплавы с покрытием. Структура твердых сплавов включает тугоплавкие карбиды TiC, WC, TiCN и т.д., а в качестве связующей фазы используют кобальт, сплав никель-молибден и др.

Спеченные твердые сплавы – это композиционные инструментальные материалы [1], прочность, которых с точки зрения контактного взаимодействия при резании будет определяться прочностью каждого структурного элемента.

Структурными элементами в спеченных твердых сплавах являются: связка, зерно, граница «зерно – зерно», граница «зерно – связка». Твердые сплавы можно рассматривать и как диперсно-упрочненные материалы [5]. Расчет σ_p разрушающих напряжений структурных элементов проводился по литературным данным [6] оценки вязкости разрушения - K_{IC} и по результатам собственных исследований.

Величина вязкости разрушения твердых сплавов приведена в табл. 1.

[©] Кабалдин Ю.Г., Кретинин О.В., Серый С.В., Шатагин Д.А., 2012.

Марка твердого сплава	K_{IC} , ΜΠα \sqrt{i}
BK8	11,6

Т15К6

Коэффициент вязкости разрушения

Для определения разрушающих напряжений используются следующие зависимости [6]:

7,2

$$\mathcal{K}_{IC} = \sigma_p \sqrt{\pi \cdot l_{\rm kp}} \quad , \tag{1}$$

$$K_{IC} = \sigma_p \sqrt{3\pi \cdot \lambda} \tag{2}$$

Таблица 1

где σ_p – разрушающее напряжении; $l_{\kappa p}$ – критическая величина дефекта; λ – толщина связующей прослойки.

Электронномикроскопическими исследованиями установлено, что размер зерен карбидной фазы в твердых сплавах изменяется от ~ 0,5 до 6 мкм, а размер прослойки – от нескольких ангстрем (нанометров) до ~ 3 мкм. По формулам (1, 2) рассчитывали разрушающие напряжения прослоек при известном параметре K_{IC} вязкости разрушения твердого сплава [6] и ее толщины (рис. 1).

Расчеты показывают, что с увеличением температуры разрушающие напряжения σ_p снижаются (рис. 1). Наибольшей прочностью, как видно из рис. 1, обладают прослойки связующей фазы с минимальной толщиной. С ростом температуры наблюдается тенденция роста σ_p с уменьшением λ толщины прослойки, особенно в мелкозернистых твердых сплавах с низким содержанием связующей фазы (%-ное отношение).

Для определения разрушающих напряжений на межфазной границе и по границе «зерно-связка» величину K_{IC} рассчитывали по зависимости, которая устанавливает связь между параметром вязкости разрушения и модулем сдвига G [5] (рис. 1).



Рис. 1. Зависимость разрушающих напряжений прослойки Со от толщины и температуры: 1 – BK8; 2 – T15K6

$$K_{IC} = 2\sigma^{e} \sqrt{\frac{Gb}{\tau_{GB}}},$$
(3)

где $\sigma^{\text{в}}$ – напряжение у вершины трещины, при котором обеспечивается ее хрупкое распространение ($\sigma^{\text{в}} = 730...1090 \text{ H/мм}^2$); $\tau_{\text{сдв}}$ – сопротивление пластическому сдвигу; *b* – вектор Бюргерса. Преобразуем уравнения (1, 2) с учетом (3) и получим уравнения (4) и (5) для определения разрушающих напряжений для границы «зерно-зерно» или для границы «зерно-связка» соответственно:

$$\sigma_{p(3-3)} = \frac{2\sigma^{\theta}\sqrt{G_{(3-3)} \cdot b \cdot \tau_{\text{CAB}}}}{\sqrt{\pi \cdot l_{\text{KD}}}},\tag{4}$$

где $G_{(3-3)}$ – модуль сдвига зерен карбидной фазы.

$$\sigma_{p(3-c)} = \frac{2\sigma^{\theta}\sqrt{G_{(3-c)}\cdot b\cdot \tau_{c,\text{CB}}}}{\sqrt{\pi \cdot l_{\text{KP}}}},$$
(5)

где G _(3-с) – модуль сдвига для границы зерно-связка.

Результаты расчетов сведены в табл. 2 и табл. 3.

Таблица 2

Результаты расчета разрушающих напряжений для структурных элементов твердого сплава ВК8

Структурный элемент	Разрушающее напряжение σ _р , МПа
Связка (λ = 1,5 мкм)	5000
Зерно (2 мкм)	180
Граница «зерно – зерно»	80
Граница «зерно – связка»	100

Таблица 3

Результаты расчета разрушающих напряжений для структурных элементов твердого сплава T15К6

Структурный элемент	Разрушающее напряжение	
	σ _p , МПа	
Связка (λ = 1,5 мкм)	4500	
Зерно (2 мкм)	$\sigma_{pWC} = 180$	
Sepho (2 mkm)	$\sigma_{p(TiW)C} = 120$	
Граница «зерно – зерно»	σ_{pWC-WC} 52	
	$\sigma_{pWC-(TiW)C}=46$	
Граница «зерно – связка»	$\sigma_{p WC - Co} = 74$	
	$\sigma_{p(TiW)C-Co} = 68$	

На рис. 2 приведена гистограмма результатов расчета разрушающих напряжений σ_p структурных элементов.

Таким образом, по результатам расчетов видно, что наиболее слабым структурным элементом в твердом сплаве являются межзеренные границы, а наиболее прочным – связующая фаза.

Приведенные расчеты позволяют утверждать, что хрупкая прочность твердых сплавов существенно определяется прочностью связующих прослоек, соизмеримых с размерами нанофаз [3, 4].

Следовательно, при спекании твердых сплавов в результате взаимодействия системы «карбид-связка» формируются тончайшие прослойки связующей фазы – нанофазы (наносистемы), обладающие высокими σ_p разрушающими напряжениями.

На рис. 3 приведены микрофотографии поверхностей изломов хрупкого разрушения режущей части инструмента из твердого сплава ВК8 и Т15К6. На рис. 3, *а* видно, что зерна WC разрушаются сколом и по межзеренному механизму, а связка – по вязкому (виден ямоч-

ный рельеф). В твердом сплаве T15К6 преобладает разрушение микросколом зерен (TiW)C, причем скол переходит из зерна в зерно вследствие их срастания в процессе спекания.

Следовательно, более высокая хрупкая прочность твердого сплава BK8, по сравнению со сплавом T15K6, обусловлена микромеханизмами разрушения этих сплавов. Высокие разрушающие напряжения прежде всего связующей фазы способствуют ее вязкому микроразрушению, который является более энергоемким, т.е. более эффективно диссипирует энергию разрушения, чем скол.



Рис. 2. Гистограмма, иллюстрирующая соотношение прочности структурных элементов твердого сплава



Рис. 3. Микрофотографии поверхности разрушения твердого сплава: *a* – BK8; *б* – T15K6 (х 9000)

В работах [1, 2] показано, что изнашивание твердых сплавов при низких скоростях сопровождается быстрым разрушением связки, раскалыванием и вырывом зерен карбидной фазы (рис. 4). Это в значительной степени обусловлено неоднородным распределением дислокаций в зернах карбидной фазы. Скопление дислокации (рис. 4, a) в локальных объемах зерен карбидной фазы вызывает их раскалывание (рис. 4, δ). Установлено, что процесс изнашивания твердых сплавов при $V_{\text{опт}}$ (оптимальной скоростью резания) сопровождается наноструктуризованием микрообъемов зерен карбидной фазы вследствие высоких контактных нагрузок и интенсивной пластической деформации поверхностных слоев инструмента.

б)





Рис. 4. Микрофотографии: *а* - дислокационной структуры твердого сплава TH-20 (х 14000), V= 15 м/мин; б – поверхности изнашивания твердого сплава TH-20 (х 5000), V= 15 м/мин, *a* = 0,2 мм

При $V_{\text{опт}}$ оптимальных скоростях резания зависимости T-V (T – стойкость инструмента) в результате роста температуры и в целом изменения температурно-скоростных условий зерна карбидной фазы фрагментируются, образуется фрагментированная (ячеистая) дислокационная структура (рис. 5, *a*). Размеры фрагментов составляют ~ 0,1 мкм, а границы фрагментов 20...30 нм. В результате при трении карбидной фазы происходит преимущественное изнашивание зерен (рис. 5, б), размер частиц износа совпадает с размером фрагмента, m.e. около 100 нм.

В связи с этим, продукты износа зерен карбидной фазы следует рассматривать как наночастицы, которые под влиянием высоких температур и давлений в дальнейшем образуют ансамбли наночастиц, залегающие (рис. 5, в) в межзеренных пространствах, где удалена связка, способствуя образованию карбидного каркаса.

Следовательно, в процессе изнашивания при $V_{\text{опт}}$. реализуется механизм наноструктурирования зерен карбидной фазы с последующим образованием ансамбля наночастиц, который следует рассматривать как результат самоорганизации системы резания. Стойкость инструмента при этом резко возрастает, и зависимость T - V является немонотонной [1, 2]. Дальнейшее увеличение скорости резания сопровождается разрушением связующей фазы (течением), замещением ее обрабатываемым материалом, что облегчает срез группы зерен карбидной фазы, и стойкость T инструмента снижается.



Рис. 5. Микрофотографии: a – дислокационной структуры твердого сплава TH-20 (х 14000), V = 50 м/мин; δ – (х 5000); e – (х 14000) – поверхности изнашивания твердого сплава TH-20, V = 50 м/мин, a = 02 мм

Возникновение новой структуры есть следствие самоорганизации [7]. Самоорганизация весьма разнообразна. Особое место занимает ее проявление в диссипативных (рассеивающих энергию) неравновесных средах. Формирование структур при необратимых процессах происходит при определенных условиях: главное из них – наличие качественного скачка при

a)

достижении критических (пороговых) значений параметров порядка. Предпосылкой для его выполнения и формирования устойчивых диссипативных структур в открытых системах, обменивающихся энергией и веществом с внешней средой, является существование определенного соотношения между производством энтропии в самой системе и обменом энтропии со средой. Количественной характеристикой устойчивости новых диссипативных структур является D_F фрактальная размерность. Оценка D_F фрактальной размерности ансамбля наночастиц осуществлялась по соотношению [8]

$$n_{\mathrm{a.H.}} \cong d^{D_F}$$
,

где *m*_{а.н}. – масса ансамбля наночастиц; *d* – размер ансамбля.

Расчеты показывают, что D_F ансамбля наночастиц стремится к трем. Это свидетельствует о том, что ансамбль наночастиц является плотной объемной структурой, обладающей высокой устойчивостью.

Процессы наноструктурирования контактных поверхностей режущего инструмента выявлены и при использовании твердых сплавов с покрытием. Установлено, что низкая термостойкость покрытий, являющихся непрерывным карбидным каркасом, способствует их мгновенному растрескиванию (рис. 6, *a*) при резании. Затем происходит отрыв частиц покрытия (рис. 6, *в*). Отрыв мельчайших частиц (наночастиц) также сопровождается формообразованием их в ансамбли, которые залегают в местах вырыва зерен твердосплавной основы. Это обстоятельство повышает износостойкость инструмента на участке «нормального» износа.

В связи с этим, было проведено межатомное взаимодействия твердых тел при взаимном перемещении. Квантово-механические расчеты позволили оценить конкретную совместимость различных структурных составляющих инструментальных и обрабатываемых материалов, а также провести расчеты энергии адсорбции различных компонентов смазки. В результате предложены как механизмы межатомного взаимодействия при трении.

При моделирования межатомного взаимодействия необходимо учитывать положение и свойства каждого атома. Эта задача сейчас успешно решается путем квантовомеханических расчётов из первых принципов (*abinitio*). Задача осложняется тем, что если в традиционных металлических материалах положение атомов в узлах кристаллической решетки определено, т.е. существует обычная повторяемость или простая трансляция элементарной ячейки, то в сложной пространственной структуре межатомного взаимодействия организацию атомов сложно задавать. Поэтому возникает вопрос: каковы принципы организации межатомных взаимодействий, последовательностей расположения атомов в пространственной структуре и ее форма для обеспечения заданных функциональных свойств?

Существует ряд методов оптимизации пространственной организации атомов при расчёте минимума энергии межатомных связей в структуре. Однако в силу требований, т.е. необходимость точного определения выгодного, с точки зрения энергетического состояния, координат каждого атома, существующие программные продукты, оказываются недостаточно эффективными при первопринципном математическом моделировании структур 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 структур. В связи с этим, предлагаются новые подходы к прогнозированию межатомного взаимодействия элементов структур и их дальнейшему эмпирическому обоснованию.

Ранее мы уже отмечали, что разработаны и численно реализованы эффективные методы моделирования сложных структур на основе теории функционала электронной плотности (ТФП, англ. DTF). Согласно ТФП, все электронные свойства системы, включая общую энергию, могут быть получены из электронной плотности (без знания волновых функций) атомов.

В программном коде программного комплекса *ab-initio* расчетов FHI (fhi96md, fhi98md) используется реализация $T\Phi\Pi$ на основе метода псевдопотенциала, позволяющего заменить часть базисных функций на некоторый эффективный потенциал. Такая замена про-

изводится автоматически при расчёте. От пользователя требуется выбрать псевдопотенциал требуемого типа. В работе используются псевдопотенциаламипредлагаемыми по умолчанию в пакете FHI98pseudo.

Авторами ставилась цель: провести *ab-initio* исследовании общей энергии элемента и распределения его электронной плотности, но и исследовать его прочностные свойства и затем эмпирически убедиться в достоверности расчетов. В связи с этим, проведены расчеты при взаимодействии со структурными составляющими твердосплавной режущей пластинки изWC-Co (зерна карбида вольфрама в кобальтовой связке) при взаимодействие с алюминием, титаном и железом.

Теоретические расчеты также основаны на теории функционала электронной плотности (DFT) в приближении обобщенного градиента (GGA), совмещенного с методом псевдопотенциалов и базисе плоских волн. Для расчетов использовался программный пакет PHI96md, 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 железа были сконструированы по схеме Труллера-Мартинса. *s*- и *p*- компоненты атомов находились по методике Хамана, а *d*- компонента – по схеме Труллера-Мартинса. В качестве базиса были выбраны плоские волны, энергия обрезания в расчетах составила 40 ридбергов. В качестве *k*-точки использовалась Г-точка зоны Бриллюэна. Для вычисления обменной и корреляционной энергии использовалось градиентное приближение в форме, предложенной Педью и Вэнгом.







Рис. 6. Расчетные схемы взаимодействия : *a* – элементарной ячейки кобальта с атомами алюминия; *б* – карбида вольфрама с атомами алюминия

Псевдопотенциалы вычислялись с помощью пакета FHI98pp, они были испытаны на отсутствие ложных состояний (ghoststates) и проверены на способность воспроизвести основные решеточные характеристики объемных материалов (постоянную решетки и модуль упругости), получены распределения электронной плотности состояний и CTM-изображения карбида вольфрама, кобальта, алюминия, титана и железа.

На рис. 6 приведены расчётные схемы для определения энергии межатомных взаимодействий CocAl и WCcAl.

В табл. 5 представлены результаты оценки межатомного взаимодействия различных систем.

Таблица 5

Система	WC-Al	Co-Al	Co - Fe	Co-Ti	WC-Ti
E,	-	-31,09	-32,6	-33,85	-
a.e.					

Расчетные значения общей энергии в системах

Наилучшие результаты при расчетах (табл. 5) достигнуты при поиске минимума энергии Со и Al, а также Со и Ti. Здесь обеспечивается наибольшая сходимость расчетов межатомных взаимодействий. При расчете взаимодействий карбида вольфрама с алюминием и титаном при переборе возможных пространственных атомарных конфигураций сходимости не достигнуто. Энергия взаимодействия в системе WC-Co составила 78,84 а.е. (атомных единиц). В табл. 6 приведены значения коэффициентов диффузии различных элементов в кобальт–связующую фазу твёрдого сплава WC-Co.

Таблица б

Коэффициенты диффузии в системах

Система	Al→Co	Fe→Co	Ti→Co
Коэффициент диффузии, см2/с	1,3	1,32	1,4

Таким образом, как и при расчете энергии межатомного взаимодействия (табл. 5), так и при расчете коэффициента диффузии (табл. 6) видно, что титан обладает как наибольшей энергией, так и наибольшим коэффициентом диффузии в кобальте.

В табл. 7 приведены расчёты энергии связи атомов Al-Ti и Al-Cr методом функционала электронной плотности. Там же приведены значения микротвёрдости покрытий, полученных при магнетронном напылении интерметаллидов – (AlTi)N и (AlCr)N.

Таблица 7

№ п/п	Система (интерметаллид)	Энергия связи (эβ)	Микротвёрдость, HV	Фрактальная раз- мерность интерме-
				таллида
1.	Al-Ti	15,6	4125	2,048
2.	Al-Cr	13,2	3931	2,042

Предложена модель образования рельефа пленок, формируемого при осаждении на поверхность потока атомов на основе роста структур из одиночных атомов, диффундирующих по поверхности. Причиной появления сложной фрактальной структуры пленки является образование устойчивых кластеров либо в результате флуктуационного образования зародышей критического размера, либо на примесных атомах, являющихся центрами зарождения кластеров. При высоких температурах возможен перенос атомов к более горячим элементам рельефа вследствие убывания энергии активации диффузии с ростом температуры. Это способствует образованию фрактальной структуры пленки. На более поздней стадии роста фрактальной пленки основным механизмом роста становится диффузионно ограниченная агрегация осаждаемых атомов.

Анализ результатов исследований (табл. 7) показывает, что энергия связи атомов в наносистемах (в интерметаллидах) коррелирует с их фрактальной размерностью, т.е. устойчивостью межатомных связей интерметаллидов, обеспечивая функциональные свойства (твёрдость) тугоплавких соединений.

На рис. 7 представлены микрофотографии, иллюстрирующие разрушения твёрдых сплавов с покрытием. Анализ показывает, что вначале происходит интенсивное трещинообразование покрытий. Это объясняется тем, что покрытие – это сплошной карбидный либо нитридный каркас с низкой прочностью межзёренных границ. Трещины из покрытия прорастают в твёрдосплавную основу, либо расслаиваются на границе раздела «покрытиеподложка». Затем изнашивается и твёрдосплавная основа. Полученные результаты объясняют высокий износ инструмента при обработке титановых сплавов, причем после разрушения покрытия, изнашивается прежде всего кобальтовая связка.



Рис. 7. Микрофотографии: *a* – микроразрушения покрытия TiC +TiCN+TiNпосле резания 60 с (х 5000), *V* = 150 м/мин; *б* – износа инструмента с покрытием Ti – TiCN+TiN(х 100), *V* – 150 м/мин, *a* = 0,2 мм; *в* – лунки износа твердосплавного инструмента с покрытием TiC+TiCN+TiN, время резания 10 мин, *V* =150 м/мин, *a* = 0,2 мм

Проведеные исследования указывают на возможность управлять процессом наноструктурирования инструментальных материалов и получать новые структурные состояния с различной иерархией ансамблей наночастиц. При конструировании режущего инструмента на твердосплавной основе следует создавать многослойные покрытия. Нижние слои должны обеспечивать прочное сцепление покрытия с твердосплавной основой и вязко тормозить рост трещин в нее при растрескивании покрытия. Верхние слои должны обеспечивать низкую фрикционную совместимость с обрабатываемым материалом. В состав СОТС (смазочноохлаждающих технологических средств) следует вводить наночастицы медьсодержащих соединений, помещенных в микрокапсулы. В зоне резания при разрушении микрокапсул наночастицывыполняют роль твердой смазки и, тем самым, повышают стойкость инструмента.

Библиографический список

- 1. Кабалдин, Ю.Г. Структура, прочность и износостойкость композиционных материалов / Ю.Г. Кабалдин. Владивосток.: Дальнаука, 1996. 183 с.
- 2. Кабалдин, Ю.Г. Структурно-энергетический подход к процессу изнашивания твердых сплавов // Известия вузов. Машиностроение. 1986. № 4. С. 127-131.
- 3. Гусев, А.И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства / А.И. Гусев. Екатеринбург. РАН. Уральское отделение. Институт химии твердого тела. 1998. – 200 с.

- 4. Золотухин, И.Б. Нанокристаллические металлические материалы // Соровский образовательный журнал. 1998. № 1. С. 103 106.
- 5. **Трефилов, В.И.** Дисперсные частицы в тугоплавких металлах / В.И. Трефилов, В.Ф. Моисеев. Киев.: Наукова думка, 1975. 240 с.
- 6. **Новиков, Н.В.** О влиянии скорости нагружения и температуры на трещиностойкость твердых сплавов / Н.В. Новиков, Н.К. Коваленко, А.Л. Майстренко // Сверхтвердые материалы. 1984. № 5. С. 20–26.
- 7. Пригожин, И. Порядок из хаоса / И. Пригожин, И. Стрингер. М.: Прогресс, 1986. 429 с.
- 8. Смирнов, В.Ф. Физика фрактальных кластеров / В.Ф. Смирнов. М.: Наука, 1998. 256 с.

Дата поступления в редакцию 10.10.2012

J.G. Kabaldin¹, O.V.Kretinin¹, S.V.Sery², DA Shatagin¹

NANOSTRUCTURING CONTACT SURFACE CARBIDE TOOLS INCUTTING

Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alexeev¹, Komsomolsk-on-Amur State Technical University²

Objective: To study the mechanism of destruction carbide coated.

Methodology: A complex study involving micro-electronic spectroscopy and quantum-mechanical calculations. **The results:** nanostructuring process identified as carbide in their manufacture (sintering) and the deposition of wearresistant coatings. The mechanism of destruction of the cutting tool is coated. Shows a fractal mechanism of deposition of coatings and coating damage by their cracking and separation of the coating.

Conclusions: are the principles of deposition of multilayer coatings with high resistance tion cracking and abrasion.

Key words: hard alloys, wear, nanostructured coatings.