



ЗАТВЕРДЖУЮ

в.о. ректора НТУ «ХПІ»

Євген СОКОЛ

14.12.2020

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок

«Розробка наукових основ створення нового класу надтвердих вакуумно-дугових наноперіодних композитних покриттів з різним типом міжшарових границь на основі нітридів перехідних металів»

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених
Ресстраційний номер Проєкту: 2020.02/0033

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок 0120U105088
«Розробка наукових основ створення нового класу надтвердих вакуумно-дугових наноперіодних композитних покриттів з різним типом міжшарових границь на основі нітридів перехідних металів»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» протокол від «06» листопада 2020 року № 35.

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту
Початок – 06.11.2020;
Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн.: 9 174 990

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік: 798 600

2-й рік: 4 486 900

3-й рік: 3 889 490

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 9 виконавців, з них:
доктори наук 2 ;
кандидати наук 2 ;
інші працівники 5 .

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Організація грантоотримувача

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут» МОН України
61002, вул. Кирпичова, 2, м. Харків
Банківські реквізити:
р/рUA 298201720343101004300004225
у ДКСУ в м. Києві
МФО 820172
Код ЄДРПОУ 02071180

Організація субвиконавця

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України
61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна
UA398201720313291001201001192
ДКСУ, код 37567646, м.Київ
ЄДРПОУ 14312223
Св-во №28756320, ІПН 143122220319

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

Розробка наукових основ наноструктурної інженерії міжшарової взаємодії в багатоперіодних вакуумно-дугових композитах для створення нового типу надтвердих покриттів.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Обґрунтування фазово-структурних станів в нанотовщинних шарах вакуумно-дугових покриттів на основі нітридів перехідних металів. Розрахунок та практична апробація різних за типом поєднань шарів з товщиною 5...15 нм при різній невідповідності (від 0,5% до 9,5%) кристалічних решіток матеріалів шарів. Вплив режимів осадження на наслідування переважної орієнтації кристалітів в нанощарах. Комплексне випробування багатошарових покриттів.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Найбільш перспективним методом створення багатошарових нанотовщинних композитних покриттів є процес конденсації при іонному бомбардуванні (КІБ). В даний час цей метод для отримання надтонких шарів (5...15 нм) тільки проходить первинну апробацію в направленні одержання надрешітчастих нанокompозитів. Основні роботи в цьому напрямку ведуться в наукових центрах США (University of Texas at Arlington, Nano-Product Engineering, Colorado USA), Китаю (Guangdong University of Technology) та Сінгапурі (Nanyang Technological University).

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Новизна проєкту, полягає в розробці наукових основ нового напрямлення наноструктурної інженерії для створення надтвердих покриттів з високою адгезійною міцністю, тріщиностійкістю та високими термодифузійними бар'єрними властивостями. При цьому вперше буде апробовано використання величини міжшарової дисторсії в суміжних шарах для оптимізації напружено-деформованого стану, а також досягнення квазіепітаксійного наслідування переважної орієнтації росту кристалітів.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)
Включає вакуумно-дуговий метод (на базі модифікованої установки «Булат-6») формування наноперіодних багат шарових композитів з товщиною шарів 5...15 нм і багат шарових композитів загальною товщиною до 10 мкм, елементний аналіз, багат факторне дослідження структурного стану (базовими будуть рентгеноструктурні, рентгенотензометричні та електронно-мікроскопічні методи), вимірювання мікро- та нанотвердості, атестація адгезійної міцності, трибологічні випробування.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Для структурної інженерії вакуумно-дугових багат шарових покриттів з нанометровою товщиною шарів запропоновано використовувати критерій невідповідності періодів решіток (δ) шарів, які сполучаються. В якості базових нітридів для шарів в бішаровому періоді багат шарових покриттів використані ZrN, MoN, CrN, TiN і (TiSi)N. В якості другого шару використані мононітриди перехідних металів і багат елементні нітриди на їх основі.

Використання рентгендифрактометричного методу фазово-структурного аналізу в якості базового методу для дослідження, дозволило встановити закономірності структурних станів у нанотовщинних шарах багат шарових композитів з товщиною шарів від 10 до 300 нм та загальною товщиною покриття до 12 мкм. При виконанні завдання 1 залежно від величини невідповідності періодів решіток шарів, що сполучаються, були встановлені умови формування границь розділу шарів різних типів. Некогерентна границя в основному утворюється при великому $\delta = (7,8 \dots 9,8)\%$. Напівкогерентне сполучення виникає при величині $\delta = 2,7\%$ для багат шарових покриттів на основі (TiSi)N. Умовою когерентного сполучення кристалічних решіток в шарах, які сполучаються в основному є мале δ (менше 1,6%). В області значень $\delta = (1,5 \dots 1,6)\%$ виявлена можливість формування частково когерентних шарів розділу.

В цьому випадку в області сполучення кристалітів з нормаллю [111] утворюється некогерентна границя, а при сполученні кристалітів з нормаллю [100] границя когерентна. На підставі отриманих результатів зроблено висновок, що особливістю вакуумно-дугових багат шарових конденсатів з нанорозмірною товщиною шарів є можливість формування когерентної границі при квазіепітаксальному зростанні шарів.

Виявлено закономірність формування в таких шарах переважної орієнтації кристалітів. Утворення переважної орієнтації з нормаллю [111] в основному відбувається в шарах на основі ZrN, TiN і (TiSi)N для яких характерна велика величина ентальпії утворення нітриду. Кристалітів з нормаллю [100] формуються в основному в шарах з невисокою ентальпії утворення нітридів, таких як MoN і CrN.

Отримані результати свідчать про великі можливості структурної інженерії вакуумно-дугових багат шарових покриттів з нанотовщинними шарами і високу ефективність застосування для дослідження таких структур рентгендифрактометричного методу.

В ході виконання 2-го завдання цього етапу показано, що збільшення негативного потенціалу зміщення (від -70 В до -220 В) при формуванні вакуумно-дугових композитів на основі ZrN дозволяє не тільки керувати переважною орієнтацією кристалітів ті субструктурними характеристиками, але і змінювати умови сполучення кристалічних решіток в надтонких (біля 8 нм) нанощарах.

Вплив потенціалу зміщення визначальним чином позначається на структурі і субструктурні характеристики одношарових ZrN вакуумно-дугових покриттів. З підвищенням U_b в інтервалі -70 ... -220 В відбувається формування текстури з віссю [111], і зростання досконалості субструктури (збільшення середнього розміру кристалітів і зменшення мікрореформації). Виявлений ефект пов'язаний зі збільшенням кінетичної енергії осаджених частинок, що сприяє збільшенню їх рухливості з утворенням переважної орієнтації кристалітів з найбільш щільноупакованої площині (111) і зростання досконалості субструктури кристалітів.

При формуванні $ZrN/(TiZr)N$ нанокompозита зі збільшенням U_b також підвищується ступінь текстурування з віссю [111] в шарах, а на субструктурному рівні збільшується середній розмір кристалітів і зменшується мікрдеформація. При цьому в шарах нітриду твердого розчину $((TiZr)N)$ значення мікрдеформації і розміру кристалітів майже в 1,5 рази нижче.

У надтонких (товщиною близько 8 нм) шарах нанокompозитів виявлено ефект збільшення міжшарової невідповідності δ з підвищенням U_b . Даний ефект свідчить, що при зміні U_b в інтервалі -70 ... -220 В частинки, збільшуючи свою енергію при осадженні, стимулюють релаксацію міжшарової деформації кристалічних решіток матеріалів, які сполучаються. Це призводить до їх більш рівноважного стану з періодом решітки близьким до рівноважного для даного складу (для нітриду твердого розчину $(TiZr)N$, розрахунковий період 0,431 нм).

Результати дослідження, отримані в рамках виконання проєкту, представлені в наступних працях:

1. Любченко І.В., Постельник Г.О., Соболев О.В. Наношарові багатоперіодні покриття на основі нітриду цирконію: склад, структура, властивості. «Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я»: тези доповідей XXVIII Міжнар. наук.-практ. конф. Харків: НТУ «ХПІ», 2020. С. 289.
2. Пінчук Н.В., Соболев О.В. Вплив подачі високовольного потенціалу в імпульсній формі на структуру та властивості вакуумно-дугових покриттів TiN . "Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я": тези доповідей XXVIII Міжнар. наук.-практ. конф. Харків: НТУ "ХПІ", 2020. С. 294.
3. Пінчук Н.В., Соболев О.В., Звягольський О.В. Особливості формування вакуумно-дугових покриттів TiN , отриманих при дії постійного потенціалу зсуву. "Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я": тези доповідей XXVIII Міжнар. наук.-практ. конф. Харків: НТУ "ХПІ", 2020. С. 295.

Надіслано 2 статті для публікації в журналах, які входять в SCOPUS:

1. O.V. Sobol'. Structural engineering of multilayer vacuum-arc coatings with nanometer-thick layers based on transition metal nitrides // Functional Materials.
2. O.V. Sobol', A.A. Postelnik, N.V. Pinchuk, A.A. Meylekhov, M.A. Zhadko, A.A. Andreev, V.A. Stolbovoy. Influence of bias potential magnitude on structural engineering of ZrN -based vacuum-arc coatings // Physics and Chemistry of Solid State.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

В теперішній час для матеріалів вакуумно-дугових покриттів розробка носить пріоритетний характер та не має прямих аналогів у світі по науковому підходу до структурної інженерії наношарів та очікуваним функціональним характеристикам. У порівнянні з іншими PVD технологіями, в першу чергу, з найбільш використовуваним в теперішній час магнетронним методом (іонно-плазмова технологія), одержані в ході виконання даного проєкту результати для вакуумно-дугового методу дозволяють значно розширити спектр фазово-структурних та напружено-деформованих станів наношарів, а також типів міжшарових границь. Це значно підвищує твердість таких нанокompозитних покриттів (до нанотвердого стану, більш за 40 ГПа), їх адгезійну міцність та тріщиностійкість.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Отримані в ході виконання проєкту результати будуть мати важливе практичне значення, бо на їх основі буде отриманий новий клас матеріалів з унікальними фізико-механічними характеристиками.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Використання результатів проєкту може бути у різних галузях науки, освіти та промисловості. В галузях науки та освіти – це в першу чергу стосується розробки наукових основ та апробація новітнього напрямку структурної інженерії – конденсованих наночарів, а також міжшарових границь різних типів при їх формування з високоіонізованої плазми вакуумно-дугового методу. Науковими установами та університетами, які можуть бути зацікавлені в цих результатах в Україні можуть бути: Інститут проблем Матеріалознавства НАН України (Київ), Інститут металофізики НАН України (Київ), Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України (Київ), ННЦ «ХФТІ» НАН України (Харків), а також університети та інститути: Київський політехнічний інститут (Київ), Львівський політехнічний інститут (Львів), Луцький політехнічний інститут (Луцьк), Національний технічний університет «Дніпровська політехніка» (Дніпро), Харківський національний автомобільно-дорожній університет (Харків).

Використання результатів в цих галузях буде сприяти всебічному підвищенню наукового рівня співробітників та навчального (конкурентоспроможного) рівня знань студентів рівня магістра за спеціальностями 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» та 132 «Матеріалознавство».

Соціальним статусом для промислових підприємств може стати підвищення конкурентоспроможності при використанні в якості захисних покриттів на деталях та вузлах в машинобудуванні та літакобудуванні, а також в якості поверхневих елементів лезвійного інструменту з надвисокою твердістю, тріщиностійкістю та адгезійною міцністю.

Науковий керівник Проєкту
професор _____

Олег СОБОЛЬ _____


(підпис)