

УДК 621.793.71

## МОДУЛЬ СДВИГА И ЭНЕРГИЯ АДГЕЗИИ НАНОПОКРЫТИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ РЕЖУЩИХ ИНСТРУМЕНТОВ

Заводинский В.Г.<sup>1</sup>, Кабалдин Ю.Г.<sup>2</sup><sup>1</sup>ФГБУН Институт Материаловедения ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия<sup>2</sup>Нижегородский Государственный технический университет, г. Нижний Новгород, Россия

### АННОТАЦИЯ

Тонкие покрытия широко применяются для защиты режущих инструментов от коррозии и износа. В первую очередь, это тугоплавкие покрытия на основе таких соединений как TiC, TiN и TiAlN, которые во много раз увеличивают срок службы инструментов. Однако до сих пор не четкого понимания деталей взаимодействия этих покрытий с материалом реза, механизмов их влияния на эффективность процесса резания и на долговечность инструмента. Это понимание может быть достигнуто в полной мере только на базе квантово-механического моделирования, которое позволяет изучать физические и механические процессы на атомном уровне.

Одной из важнейших характеристик любых покрытий является энергия адгезии, то есть работа, необходимая на отрыв покрытия от подложки. В данной статье описаны результаты квантово-механического исследования методами теории функционала плотности и псевдопотенциала, с учетом спиновой поляризации, прочности адгезии наноразмерных покрытий TiC, TiN и TiAlN с поверхностью железа (основного компонента стали) и кобальта (связующего материала твердосплавных резцов типа WC-Co).

Расчеты показали, что энергия адгезии данных покрытий с железом и кобальтом достаточно велика для обеспечения их надежного сцепления этих соединений с режущим инструментом при резании и лежит в интервале 3,5-4,1 Дж/м<sup>2</sup>, что согласуется с имеющимися литературными данными.

Основной физико-механической характеристикой, отвечающей за износостойкость системы «покрытие-подложка» в процессе ее использования в качестве реза, можно считать модуль сдвига. В данной работе проведены расчеты, моделирующие сдвиговые деформации, и определены следующие величины модуля сдвига  $G$  (в ГПа):  $G(\text{TiC-Fe})=63$ ;  $G(\text{TiN-Fe})=68$ ;  $G(\text{TiAlN-Fe})=120$ ;  $G(\text{TiC-Co})=52$ ;  $G(\text{TiN-Co})=57$ ;  $G(\text{TiAlN-Co})=115$ .

Расчетные величины модуля сдвига для покрытий TiC, TiN и TiAlN на кобальте несколько ниже величин, полученных для этих же покрытий на железе. По-видимому, это связано с тем, что в упругие свойства системы «покрытие-подложка» дает свой вклад не только покрытие, но и подложка, а модуль сдвига железа (82 ГПа) больше модуля сдвига кобальта (75 ГПа). Как на железной подложке, так и на кобальте выполняются соотношения:  $G(\text{TiAlN-Fe/Co}) > G(\text{TiN-F/Co}) > G(\text{TiC-Fe/Co})$ .

**Ключевые слова:** защитные покрытия; инструменты; адгезия, модуль сдвига; моделирование

## SHEAR MODULE AND ADHESION ENERGY OF NANOCOATINGS USED FOR CUTTING TOOLS

Zavodinsky V.G.<sup>1</sup>, Kabaldin Yu.G.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute for Materials Science of the Russian Academy of Sciences, Khabarovsk, Russia*

<sup>2</sup>*Nizhny Novgorod State Technical University, Nizhny Novgorod, Russia*

## ABSTRACT

Thin coatings are widely applied to protection of cutting tools against corrosion and wear. First of all, it is refractory coatings on the basis of such compounds as TiC, TiN and TiAlN which many times over increase the work life of tools. However still there is no clear understanding of details of interaction of these coatings with material of a cutter, mechanisms of their influence on efficiency of the cutting process and on durability of the tool. This understanding can be reached fully only on the basis of quantum-mechanical modeling which allows to study physical and mechanical processes at the atomic level.

One of the most important characteristics of any coatings is the adhesion energy that is the work for separation a coating from a substrate. In this article results of a quantum-mechanical study by methods of the density functional theory and the pseudo-potential, taking into account spin polarization, the adhesion durability of nanodimensional coatings of TiC, TiN and TiAlN on the surface of iron (the main component of steel) and cobalt (binding material of hard-alloy cutters like WC-Co) are described.

Calculations have shown that the adhesion energy of these coatings on iron and cobalt is enough for ensuring their reliable coupling of these compounds with the cutting tool when cutting and lies in the range of 3,5-4,1 J/m<sup>2</sup> that is coordinated with the available literary data.

The main physicomachanical characteristic which is responsible for wear resistance of the “coating-substrate” system in the course of its use as a cutter can be considered the shear module. In this work the calculations modeling shear deformations were carried out and the following values of the shear module have been obtained:  $G$  (GPa):  $G(\text{TiC-Fe})=63$ ;  $G(\text{TiN-Fe})=68$ ;  $G(\text{TiAlN-Fe})=120$ ;  $G(\text{TiC-Co})=52$ ;  $G(\text{TiN-Co})=57$ ;  $G(\text{TiAlN-Co})=115$ .

Calculated values of the shear module for coatings of TiC, TiN and TiAlN on cobalt are slightly lower than the values obtained for the same coatings on iron. Apparently, it is connected with a fact that contribution in elastic properties of the “coating-substrate” system makes not only a covering, but also a substrate; and the iron shear module (82 GPa) is bigger than the cobalt shear module (75 GPa). Both on an iron substrate, and on cobalt the following ratios are carried out:  $G(\text{TiAlN-Fe/Co}) > G(\text{TiN-F/Co}) > G(\text{TiC-Fe/Co})$ .

**Keywords:** protection coatings; tools; adhesion; shear module; modeling

## ВВЕДЕНИЕ

Покрyтия TiC, TiN и TiAlN широко применяются для повышения эффективности режyщих инструментов при механообработке различных железоуглеродистых сталей, нержавеющей сталей, жаропрочных сплавов и т.д. Экспериментальному исследованию их механических свойств посвящено огромное число публикаций, общее представление о которых можно получить, например, в работах [1-18]. Однако известно, что свойства покрытий сильно зависят как от технологии нанесения покрытий, так и от состава и структуры пластины (стальной или твердосплавной), играющей роль подложки при их осаждении. Поэтому имеющиеся экспериментальные данные по оценке механических свойств отдельных тугоплавких соединений и покрытий на их основе значительно разнятся. Вследствие этого необходимы теоретические исследования, которые могли бы ответить на многие имеющиеся вопросы. Однако, надежных расчетов, основанных на квантовой механике и посвященных

хотя бы косвенно данной проблеме, имеется весьма ограниченное количество [19-27], и такие расчеты, по-прежнему, остаются актуальными.

Поскольку речь идет о покрытиях, предназначенных для повышения эффективности режущих инструментов, то мы поставили задачу оценить сопротивление их сдвиговым нагрузкам, т.е. вычислить модуль сдвига, так как именно он, в значительной степени, определяют рабочие характеристики покрытий под воздействием высоких контактных нагрузок при резании.

Другой важной характеристикой изучаемых систем является энергия адгезии, поскольку покрытие должно удерживаться на основе резца и не отрываться от него при резании. Очевидно, что она должна быть сопоставима с энергией отрыва зерен железа друг от друга (1.4-4.7 Дж/м<sup>2</sup> [26] в зависимости от типа межзеренной границы). При осаждении на твердосплавную основу (система WC-Co), частицы покрытий, в основном, взаимодействуют с кобальтовой фазой, что выражается в островковом сцеплении покрытия с подложкой и проявляется в очаговом изнашивании покрытия при резании [27], поэтому весьма важно исследовать адгезию покрытий также и с кобальтом.

## 1. МЕТОДЫ И МОДЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЙ

Все расчеты, описанные в данной статье, проведены с помощью программного пакета FHI96spin, который является модификацией пакета FHI96md [28], и был ранее успешно использован для изучения механических свойств многих наносистем, в том числе и содержащих TiC, TiN и TiAl, Fe и Co [29-32]. Этот пакет основан на спин-поляризованной версии теории функционала плотности [33,34], методе псевдопотенциала [35] и наборе плоских волн. В данной работе использовались псевдопотенциалы, построенные с помощью пакета FHI98PP [36]. Все эти потенциалы являются сепарабельными, трансферабельными и нормо-сохраняющими. Они проверены на отсутствие так называемых "ложных" состояний (ghost states) и использованы для тестового определения равновесных параметров решетки и объемного модуля упругости. Во всех случаях для учета обменно-корреляционного взаимодействия применялась аппроксимация обобщенных градиентов (generalized gradient approximation) [37] и выполнялась оптимизация атомной геометрии.

Для проведения вычислений использовались так называемые суперячейки, в которых размещались слоистые структуры (пластины), моделирующие тонкие покрытия на режущем инструменте. Поясним, что понятие «суперячейка» вводится при моделировании поверхности твердого тела, а также молекул и других нанообъектов, методами, ориентированными на системы, обладающими трансляционной симметрией. При изучении кристаллов в роли суперячейки выступает ячейка кристаллической решетки, которая программным способом повторяется в трехмерном пространстве, описывая бесконечный кристалл. Для исследования поверхности или покрытия размеры суперячейки по двум направлениям (в плоскости поверхности) выбираются из соображений ее периодического повторения, а в перпендикулярном направлении размер суперячейки задается достаточно большим, чтобы обеспечить пренебрежимо слабое взаимодействие между изучаемой системы (заданной в виде пластины) и ее виртуальными отображениями (которые программа рассматривает как реальные).

В нашем случае, исследуемые системы представляли собой контакт двух пластин, одна из которых моделировала материал основы резца, а вторая – материал покрытия. Каждая из пластин состояла из трех атомных слоев. В качестве материала покрытия использовались кристаллы TiC, TiN и TiAlN. Основа резца моделировалась либо слоями железа, либо слоями кобальта.

На рисунке 1 приведена схема покрытий TiC, TiN и TiAlN на железе со структурой  $\alpha$ -феррит. Кристаллическая структура  $\alpha$ -феррита представляет собой объемноцентрированную решетку со стороной 0,2867 нм. Рассчитанная нами постоянная решетки составила 0,288 нм. Карбид и нитрид титана имеют кубическую решетку типа NaCl со сторонами 0,433 нм, и 0,424 нм, соответственно. Таким образом, имеется большое несоответствие решеток, и весьма затруднительно построить необходимую для расчетов модель, имеющую общую периодичность в обеих частях пластины, что является обязательным условием для моделирования кристаллических систем с помощью методов, опирающихся на трансляционную симметрию.

Однако нетрудно заметить, что удвоенный период решеток TiC и TiN весьма близок к утроенному периоду решетки  $\alpha$ -Fe. Таким образом, мы все же можем построить периодическую систему (с дефектом типа ядра дислокации), которая, как нам кажется, достаточно реально отображает возможную структуру границы покрытий TiC-Fe и TiN-Fe. Авторы книги [38] указывают, что именно дислокационная структура границы является энергетически выгодной при формировании контакта материалов с большим несоответствием решеток. Схема ячейки такой системы изображена на рис.1.

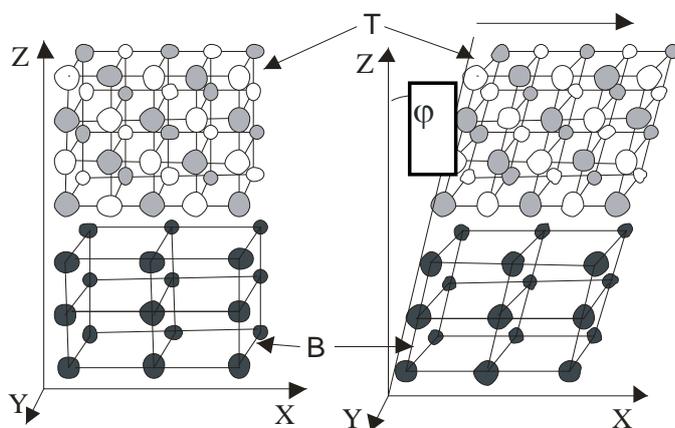


Рис.1. Схема моделирования контакта материала покрытия (TiC, TiN и TiAlN), с поверхностью феррита при вычислении энергии адгезии (левая часть рисунка) и модуля сдвига (правая часть рисунка). Черные шары – атомы железа, белые – атомы углерода либо азота, серые шары – атомы титана либо алюминия. Нижний слой феррита обозначен буквой В (bottom), верхний слой покрытия – буквой Т (top). Угол сдвига обозначен как  $\phi$ .

Подчеркнем, что при моделировании группы атомов, представленные на рис.1, периодически транслируются в направлениях X и Y, формируя тем самым бесконечную пластину наноразмерной толщины, а в направлении Z между этой пластиной и ее периодическими отображениями выдерживается расстояние, достаточное для того, чтобы взаимодействие между ними было пренебрежимо малым.

Моделирование покрытия TiAlN представляет более сложную задачу.

Дело в том, что данное соединение представляет собой матрицу TiN, в которой часть атомов Ti заменена атомами Al. Соотношение количеств атомов Ti и Al в данном соединении может варьироваться в широком интервале (от 0 до 1), а постоянная решетки при этом изменяется от 0,406 нм до 0,424 нм. В данной работе по аналогии с работой [24] использовалась структура  $Ti_{0.5}Al_{0.5}N$  с одинаковым количеством атомов Ti и Al, распределенных равномерно в материале покрытия.

При выполнении всех вычислений фиксировались координаты самого нижнего слоя подложки (B), что тем самым имитировало неподвижность приповерхностного слоя инструмента. Начальный этап вычислений заключался в нахождении равновесной структуры исследуемой системы и ее равновесной полной энергии. После этого проводились дальнейшие расчеты. Возможность фиксации (т.е. неизменности) координат атомов предусмотрена в пакете FN96spin, использованного нами для проведения всех расчетов.

Для вычисления энергии адгезии  $E_{adh}$  энергия полной равновесной системы, состоящей из слоя подложки ( $s$ ) и покрытия ( $c$ ) –  $E(s+c)$ , сопоставлялась с суммой энергий отдельных подсистем: энергии подложки  $E(s)$  и энергии покрытия  $E(c)$

$$E_{adh} = [E(s+c) - E(s) - E(c)] / S_{xy}$$

где  $S_{xy}$  – площадь поверхности покрытия в плоскости XY.

Для нахождения модуля сдвига проводилась серия вычислений, в ходе которой атомы верхнего слоя покрытия ( $T$ ) смещались вдоль направления X с шагом  $\Delta X=0,4$  а.е. (1 а.е.=0,0529 нм) и фиксировались на каждом шаге, в то время как остальным атомам (кроме атомов нижнего слоя подложки B) позволялось смещаться под действием межатомных сил и находить свои новые равновесные положения. Таким образом, мы находили зависимость энергии системы  $E$  от сдвиговой деформации и вычисляли величину модуля сдвига  $G$  по формуле  $G = \frac{\Delta E}{\Delta X} \frac{1}{S_{xy}} \frac{1}{\operatorname{tg} \varphi}$ , где  $\operatorname{tg} \varphi$  – тангенс угла сдвига.

## 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОКРЫТИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖЕЛЕЗА

### 2.1. Энергия адгезии.

Как указано в предыдущем разделе, энергия адгезии вычислялась как разница энергии полной системы, состоящей из подложки и покрытия, и суммы энергий отдельных подсистем: подложки и покрытия. Именно таким образом находится энергия адгезии в теоретических работах (см. например [19,20]). Экспериментально измерить величину энергии адгезии весьма затруднительно, поэтому в качестве количественной характеристики используют силу адгезии, которая определяется как сила (отнесенная к единичной площади), необходимая для прямого отрыва покрытия от подложки. Под прямым отрывом понимается отрыв в направлении, нормальном к границе раздела. Сила адгезии может быть найдена теоретически, путем проведения соответствующего моделирования, этой задаче будет посвящена наша отдельная работа, здесь же мы ограничимся вычислением энергии адгезии.

Величины энергии адгезии для изученных систем на поверхности железа приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Энергия адгезии для слоев TiC, TiN и TiAlN на поверхности альфа-феррита.

Система		TiC-Fe	TiN-Fe	TiAlN-Fe
$E_{adh}$ , Дж/м <sup>2</sup>	Наши расчеты	3.73	4.16	3.68
	Другие данные	2.56 [19]; 3.82 [20]	3.79 [20]	

Из таблицы следует, что наши результаты вполне удовлетворительно согласуются с имеющимися литературными данными, которые также получены путем квантово-механических расчетов. Что касается энергии адгезии покрытия TiAlN с железом, то таких литературных данных нами не найдено. Можно сказать, что в пределах неизбежных погрешностей, расчеты для всех рассмотренных покрытий дают примерно одну и ту же величину: около 4 Дж/м<sup>2</sup>. Выше указывалось, что по литературным данным величина энергии разрыва границы зерен в железе лежит в пределах 1,4-4,7 Дж/м<sup>2</sup> [26]. По нашим данным (для плоскости (100)) [39] величина энергии разрыва связи равна 1,66 Дж/м<sup>2</sup>. Т.е. наши расчеты подтверждают, что данные покрытия имеют хорошее сцепление со стальным режущим инструментом.

Интересно сравнить величины энергии адгезии с величинами поверхностной энергии  $E_{surf}$  использованных нами материалов для этой же плоскости (100). В опубликованных данных мы нашли  $E_{surf}$  для железа (феррита) – 3.96 Дж/м<sup>2</sup> [40], для TiC – 2.17 Дж/м<sup>2</sup> [41], для TiN – 1.7 Дж/м<sup>2</sup> [42]. Интуитивно кажется, что материал с меньшей поверхностной энергией (TiN) должен сильнее взаимодействовать с той же подложкой (Fe), чем материал с большей поверхностной энергией (TiC), ибо величина поверхностной энергии характеризует степень ненасыщенности связей поверхностных атомов. По нашим расчетам именно так и получается, однако другие данные [20], приведенные в таблице, не слишком хорошо согласуются с этой простой идеей, т.е. прямой связи между величинами поверхностной энергии и энергией адгезии нет.

## 2.2. Модуль сдвига.

Модуль сдвига покрытий находился путем вычисления производной полной энергии системы по величине тангенса угла сдвига на начальном участке графика изменения энергии.

Результаты исследования реакции покрытий TiC, TiN и TiAlN на сдвиговые нагрузки приведены на рис.2.

Из рис.2 нетрудно увидеть, что модули сдвига рассматриваемых покрытий, заметно отличаются:  $G(\text{TiC-Fe}) < G(\text{TiN-Fe}) < G(\text{TiAlN-Fe})$ . При этом модуль сдвига системы TiAlN-Fe превышает  $G(\text{TiN-Fe})$  почти в два раза. Для массивных же материалов соотношение между ними обратное:  $G(\text{TiAlN}) = 133,3$  ГПа [16], а  $G(\text{TiN}) = 202,3$  ГПа [17]. Возможно, это связано с некими особенностями взаимодействия азота и алюминия с металлом подложки, а возможно – это артефакт расчета. Дело в том, что в работе [17] величина модуля сдвига получена не прямым расчетом, а через модуль Юнга и коэффициент Пуассона. Этот момент, безусловно, требует дальнейшего детального исследования.

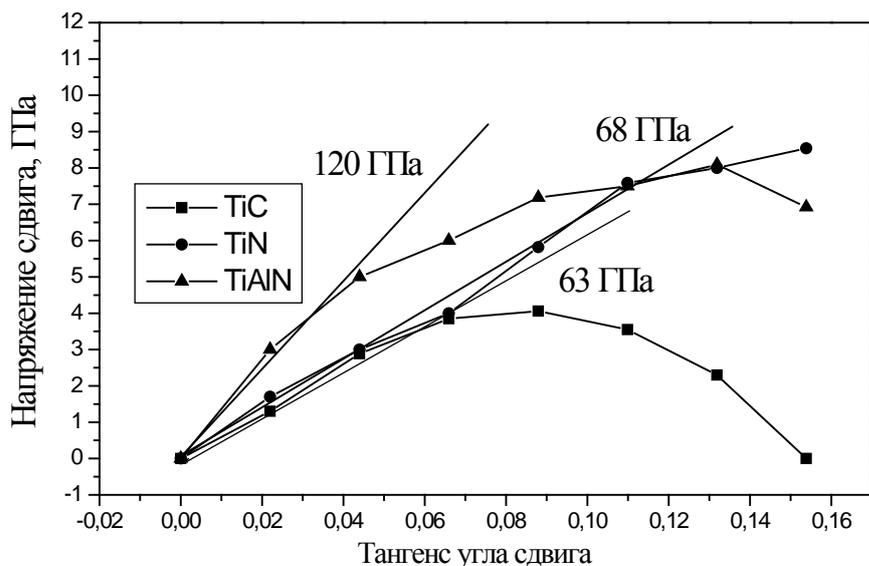


Рис.2. Зависимость сдвигового напряжения ( $\Delta E/\Delta X$ ) от тангенса угла сдвига для исследованных покрытий на железе. Прямые наклонные линии указывают среднее направление производной, по которой находилось значение модуля сдвига  $G$ .

### 3. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОКРЫТИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КОБАЛЬТА

#### 3.1. Энергия адгезии.

При моделировании покрытий на кобальте мы исходили из того, что кобальт не является основой твердосплавного режущего инструмента, а выступает лишь в качестве прослойки между кристаллитами твердых материалов. Более ранние расчеты показали, что в случае сплава WC-Co атомы кобальта выстраиваются на границе с карбидом вольфрама эпитаксиальным образом [30,31], то есть, их расположение повторяет геометрию карбида вольфрама. По-видимому, такая же ситуация присутствует на границах с твердыми соединениями титана. Поэтому мы принимали структуру слоев кобальта, играющих в нашей работе роль подложки, подобной структуре слоев покрытия (рис.3).

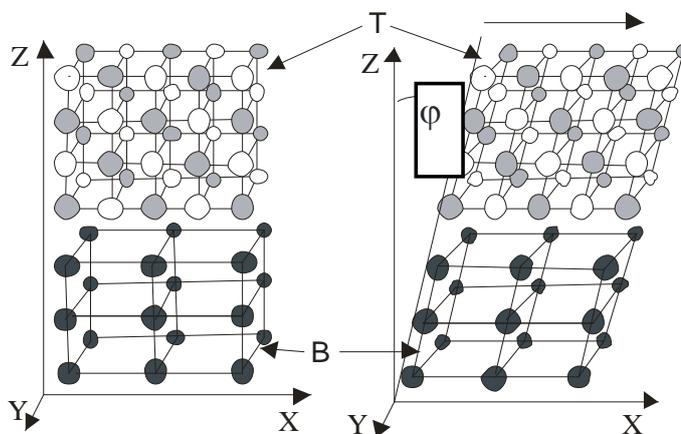


Рис.3. Схема моделирования контакта материала покрытия (TiC, TiN и TiAlN) с поверхностью кобальта при вычислении энергии адгезии (левая часть рисунка) и модуля сдвига (правая часть рисунка). Черные шары – атомы

кобальта, белые – атомы углерода либо азота, серые шары – атомы титана либо алюминия.

Результаты расчетов энергии адгезии покрытий на кобальте приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Энергия адгезии для слоев TiC, TiN и TiAlN на кобальте.

Система	TiC-Co	TiN-Co	TiAlN-Co
$E_{adh}$ , Дж/м <sup>2</sup>	4.10 2.57-2.80 [25]	3.66	3.47

Можно видеть, что величины энергии адгезии на кобальте близки к таковым для случая, когда в качестве подложки выступает железо. То есть, можно сказать, что данные покрытия должны иметь хорошее сцепление с резцами на основе твердых сплавов WC-Co. При сравнении вычисленной нами величины энергии адгезии TiC на Co с литературными данными следует иметь в виду, что приведенные данные [25] получены для случая, когда наноразмерная прослойка кобальта помещена между двумя кристаллитами TiC. Этот случай весьма отличается от рассмотренного нами случая, когда нанопластина Co лишь одной своей стороной соприкасается с нанопластиной TiC, в то время как вторая ее сторона жестко зафиксирована. По-видимому, эта разница граничных условий и определяет разницу результатов. Впрочем, разница эта не катастрофическая. Поверхностная энергия кобальта по данным работы [43] равна 2.74 Дж/м<sup>2</sup>, что существенно меньше величины 3.96 Дж/м<sup>2</sup>, приведенной нами в предыдущем разделе для железа, и, по-видимому, это опять никак не связано напрямую с различиями величин энергии адгезии одних и тех же материалов на железе и на кобальте. Каждый конкретный случай требует отдельного детального рассмотрения.

### 3.2. Модуль сдвига.

На рис.4 представлена реакция покрытий на кобальте на сдвиговые деформации.

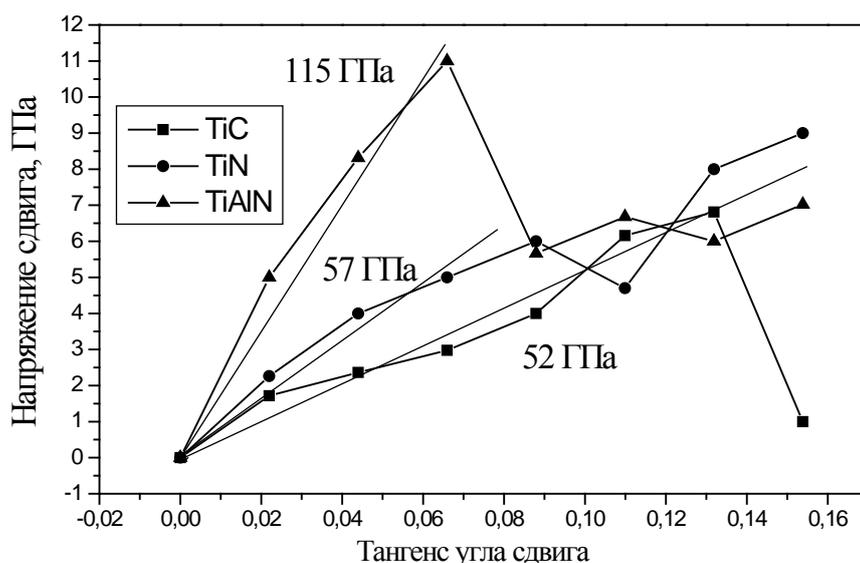


Рис.4. Зависимость сдвигового напряжения ( $\Delta E/\Delta X$ ) от тангенса угла сдвига для исследованных покрытий на кобальте. Прямые линии указывают среднее

направление производной, по которой находилось значение модуля сдвига  $G$ .

Как следует из рис.4, величины модуля сдвига для покрытий TiC, TiN и TiAlN на кобальте несколько ниже величин, полученных для этих же покрытий на железе. По-видимому, это связано с тем, что в упругие свойства системы «покрытие-подложка» дает свой вклад не только покрытие, но и подложка, а модуль сдвига железа (82 ГПа) больше модуля сдвига кобальта (75 ГПа). Как и на железной подложке, на кобальте выполняются соотношения:  $G(\text{TiC-Co}) < G(\text{TiN-Co}) < G(\text{TiAlN-Co})$ .

## ВЫВОДЫ

Из проведенных расчетов можно сделать следующие выводы:

- 1) Энергия адгезии покрытий TiC, TiN и TiAlN с железом и кобальтом достаточно велика для обеспечения надежного сцепления этих соединений с режущим инструментом при резании и лежит в интервале 3.5-4.1 Дж/м<sup>2</sup>. Степень удержания покрытия на подложке можно охарактеризовать отношением энергии адгезии покрытия с кобальтом к энергии адгезии покрытия с железом. Наибольший коэффициент удержания покрытия на подложке наблюдается у карбида титана вследствие высокой энергии адгезии его с кобальтом, т.е. структурной составляющей твердых сплавов.
- 2) Модуль сдвига покрытий практически не зависит от типа подложки и близок к модулю сдвига материала покрытия.
- 3) В настоящее время существует большое количество косвенных экспериментальных методов оценки силы сцепления покрытий со стальной и твердосплавной основой. Однако они не позволяют количественно оценить энергию их адгезии. Как показано выше, квантово-механические расчеты имеют такую возможность. Это открывает перспективы разработки новых составов и структуры покрытий для механообработки широкой гаммы обрабатываемых материалов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Komarov F.F., Konstantinov S.V., Pogrebnyak A.D., Pilko V.V., Kozak C., Opielak M. *Formation and characterization of nanostructured composite coatings based on the TiN phase* // Acta Physica Polonica A. – 2014. – Vol.125. – Pp.1292-1295.
2. Danişman Ş., Savaş S., Topal E.S. *Comparison of wear behaviours of cathodic arc TiN, TiAlN coated and uncoated twist drills under aggressive machining conditions* // Tribology in Industry. – 2008. – Vol.30. – No.1&2. – Pp.17-21.
3. Mubarak A., Hamzah E., Toff M.R.M. *Influence of nitrogen gas flow rate on the microstructural and mechanical properties of tin deposited carbon steel synthesized by CAE PVD technique* // ASEAN J. on Science and Technology for Development. – 2006. – Vol.23. – Iss.4. – Pp.239-251.
4. Alat E., Motta A.T., Comstock R.J., Partezana J., Wolf D.E. *Multilayer (TiN, TiAlN) ceramic coatings for nuclear fuel cladding* // J. of Nuclear Materials. – 2016. – Vol.78. – Pp.236-244.
5. Dubois J.-M., Belin-Ferré E. *Friction and solid-solid adhesion on complex metallic alloys* // Science and Technology of Advanced Materials. – 2014. – Vol.15. – Pp.034804(20).

6. Joo Y.-K., Zhang S.-H., Yoon J.-H., Cho T.-Y. *Optimization of the adhesion strength of arc ion plating TiAlN films by the Taguchi method* // Materials. – 2009. – Vol.2. – Pp.699-709.
7. Максимов М. *Износостойкие покрытия как движитель инновационного процесса в технологии инструментальных материалов и современной металлообработке* // <http://www.nanonewsnet.ru/articles/2010>.
8. Титов В. *Покрытия для режущего инструмента состояние вопроса и перспективы* // НМ-ОБОРУДОВАНИЕ. – 2004. – Т.1. – С.26-29.
9. Кабалдин Ю.Г. *Самоорганизация и наноструктурные процессы при резании*. – Germany: Lambert Academic Publishing, 2012. – 184 с.
10. Liu J., Ma C., Du H. *A comparative study of TiAlN and CrAlN coatings deposited on sialon ceramic cutting inserts by physical vapor deposition* / 2<sup>nd</sup> Intern. Conf. on Applied Mechanics, Electronics and Mechatronics Engineering (AMEME 2017). – 2017. – ISBN: 978-1-60595-497-4.
11. Chawla V. *Microstructural characteristics and mechanical properties of nanostructured and conventional TiAlN and AlCrN coatings on ASTM-SA210 grade A-1 boiler steel* // Hindawi Publishing Corporation, ISRN Corrosion. – 2013. – ID 231035, 14 p., <http://dx.doi.org/10.1155/2013/231035>.
12. Овчинников Е.В., Чекан Н.М. *Многокомпонентные термостойкие плазмохимические покрытия* // Прогресивні технології і системи машинобудування. – 2014. – Т.2(48). – С.3-9.
13. Chandrashekar A., Khabadi V.R., Bhide R. *Scratch wear resistance of TiAlN and AlCrN coated EN-353 steel* // J. of Material Science and Engineering. – 2016. – Vol.5. – Pp.251-259.
14. Chim Y.C., Ding X.Z., Zeng X.T., Zhang S. *Oxidation resistance of TiN, CrN, TiAlN and CrAlN coatings deposited by lateral rotating cathode arc* // Thin Solid Films – 2009. – Vol.517. – Pp.4845-4849.
15. Локтев Д., Ямашкин Е. *Основные виды износостойких покрытий* // Наноиндустрия. – 2007. – Т.5. – С.24-30.
16. Yan J.Y., Sun Y.D., Li D.J., Liu M.Y., Dong L., Cao M., Gao C.K., Wang N., Deng X.Y., Gu H.Q., Wan R.X., X. Sun. *High-temperature stability of TiAlN/TiB<sub>2</sub> multilayers grown on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrates using IBAD* // Surface and Coatings Technology. – 2013. – Vol. 229. – Pp.105-108.
17. Chen H., Peng F., Mao H., Shen G., Liermann H.-P., Li Z., Shu J. *Strength and elastic moduli of TiN from radial X-ray diffraction under nonhydrostatic compression up to 45 GPa* // J. of Applied Physics. – 2010. – Vol.107. – Pp.113503.
18. Shen P., Nose M., Fujii H., Nogi K. *Wettability of TiAlN films by molten aluminum* // Thin Solid Films. – 2006. – Vol.515. – Pp.2009-2014.
19. Arya A., Carter E.A. *Structure, bonding, and adhesion at the TiC(100)/Fe(110) interface from first principles* // J. of Chemical Physics. – 2003. – Vol.118. – Pp.8982-8996.
20. Lee J.H., Freeman A.J., Olson G.B. *Metal/ceramic adhesion at the Fe/TiN interface: Electronic and magnetic structure, and effect of S impurities* // <https://www.researchgate/publication/253515559>.
21. Lee J.-H., Shishidou T., Zhao Y.-J., Freeman A.J., Olson G.B. *Strong interface adhesion in Fe/TiC* // Philosophical Magazine. – 2005. – Vol.85. – No.31. – Pp.3683-3697.

22. Al Shafaay B., Abas S.R., Hashim A.S.K., Musa A.-A.O. *Structural, electronic and thermal properties of TiC compound in sodium chloride structure* // Iraq J. of Applied Physics. – 2015. – Vol.11(1). – Pp.9-14.
23. Liu J.Z., van de Walle A., Ghosh G., Asta M. *Structure, energetics, and mechanical stability of Fe-Cu bcc alloys from first-principles calculations* // Physical Review B. – 2005. – Vol.72. – Pp.144109.
24. Abrikosov I.A., Knutsson A., Alling B., Tasnadi F., Lind H., Hultman L., Oden M. *Phase stability and elasticity of TiAlN* // Materials. – 2011. – Vol.4. – Pp.1599-1618.
25. Dudiy S.V. *Effect of Co magnetism on Co/TiC(001) interface adhesion: a first-principles study* // Surface Science. – 2002. – Vol.497. – Pp.171-182.
26. Hung A., Yarovsky I., Muscat J., Russo S., Snook I., Watts R.O. *First-principles study of metallic iron interfaces* // Surface Science. – 2002. – Vol.501. – Pp.261-269.
27. Кабалдин Ю.Г., Власов Е.Е., Немцов Ю.Ю. *Выбор состава и структуры покрытий для режущего инструмента на основе квантово-механических расчетов* // Известия Высших Учебных Заведений. Машиностроение. – 2015. – Т.9(666). – С.52-58.
28. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. *Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamic* // Computational Physics Communications. – 1997. – Vol.107. – Pp.187-205.
29. Zavodinsky V.G. *Ab initio study of the fcc-WC(100) surface and its interaction with cobalt monolayers* // Applied Surface Science. – 2011. – Vol.257. – Pp.3581-3585.
30. Заводинский В.Г. *Механические характеристики наноразмерных прослоек кобальта в твердых сплавах WC/Co* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2011. – №2. – С.177-183.
31. Zavodinsky V., Kabaldin Y. *Investigation of Aluminum Based Composites Durability* // Intern. J. of Composite Materials. – 2017. – Vol.7(4). – Pp.127-129.
32. Zavodinsky V., Kabaldin Y. *Influence of dopants on mechanical properties of steel: A spin-polarized pseudopotential study* // J. of Materials Science and Engineering. – 2017. – Vol.6. – Pp.354.
33. Hohenberg H., Kohn W. *Inhomogeneous electron gas* // Physical Review. – 1964. – Vol.136. – Pp.B864-B871.
34. Kohn W., Sham J.L. *Self-consistent equations including exchange and correlation effects* // Physical Review. – 1965. – Vol.140. – Pp.A1133-A1138.
35. Cohen M.L., Heine V. *Pseudopotential theory of cohesion and structure* / In: Solid State Physics. – New York: Academic Pres, 1970. – Vol.24. – Pp.38-249.
36. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory* // Computational Physics Communications. – 1999. – Vol.119. – Pp.67-165.
37. Perdew J.P., Wang Y. *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy* // Physical Review B. – 1986. – Vol.33. – Pp.8800-8802.
38. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. *Введение в физику поверхности*. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
39. Заводинский В.Г., Кабалдин Ю.Г. *Квантово-механическое исследование влияния примесей (С и Р) на прочностные характеристики феррита ( $\alpha$ -Fe)* // Computational nanotechnology. – 2017. – №1. – Pp.36-38.
40. Liqiu Guo, Guomin Hua, Binjie Yang, Hao Lu, Lijie Qiao, Xianguo Yan, and Dongyang Li *Electron work functions of ferrite and austenite phases in a duplex*

*stainless steel and their adhesive forces with AFM silicon probe* // Science Reports. – 2016. – Scientific Reports 6. – Article number: 20660 (doi: 10.1038/srep20660).

41. Bazhanov D.I., Knizhnik A.A., Potapkin B.V., Bagaturyants A. *Impact of strain on the surface properties of transition metal carbide films: First-principles study* // J. of Applied Physics. – 2010. – Vol.107. – P.083521.
42. Ryota Nakanishi, Shinsuke Kunitsugu, Koji Sueoka *First principles calculation on the surface energy of metal nitride with NaCl structure* // J. of the Surface Finishing Society of Japan. – 2010. – Vol.61(7). – P.535(7).
43. Skriver H.L., Rosengaard N.M. *Surface energy and work function of elemental metals* // Physical Review B. – 1992. – Vol.46(11). – Pp.7157-7168.

## REFERENCES

1. Komarov F.F., Konstantinov S.V., Pogrebnyak A.D., Pilko V.V., Kozak C., Opielak M. *Formation and characterization of nanostructured composite coatings based on the TiN phase*. Acta Physica Polonica A, 2014, Vol.125, Pp.1292-1295.
2. Danişman Ş., Savaş S., Topal E.S. *Comparison of wear behaviours of cathodic arc TiN, TiAlN coated and uncoated twist drills under aggressive machining conditions*. Tribology in Industry, 2008, Vol.30, No.1&2, Pp.17-21.
3. Mubarak A., Hamzah E., Toff M.R.M. *Influence of nitrogen gas flow rate on the microstructural and mechanical properties of tin deposited carbon steel synthesized by CAE PVD technique*. ASEAN J. on Science and Technology for Development, 2006, Vol.23, Iss.4, Pp.239-251.
4. Alat E., Motta A.T., Comstock R.J., Partezana J., Wolf D.E. *Multilayer (TiN, TiAlN) ceramic coatings for nuclear fuel cladding*. J. of Nuclear Materials, 2016, Vol.78, Pp.236-244.
5. Dubois J.-M., Belin-Ferré E. *Friction and solid-solid adhesion on complex metallic alloys*. Science and Technology of Advanced Materials, 2014, Vol.15, Pp.034804(20).
6. Joo Y.-K., Zhang S.-H., Yoon J.-H., Cho T.-Y. *Optimization of the adhesion strength of arc ion plating TiAlN films by the Taguchi method*. Materials, 2009, Vol.2, Pp.699-709.
7. Maksimov M. *Iznosostojkie pokrytiya kak dvizhitel' innovatsionnogo protsessa v tekhnologii instrumental'nykh materialov i sovremennoj metalloobrabotke [Wearproof coatings as a driver of innovative process in technology of tool materials and modern metal working]*. <http://www.nanonewsnet.ru/articles/2010>.
8. Titov V. *Pokrytiya dlya rezhushhego instrumenta sostoyanie voprosa i perspektivy [Coatings for the cutting tool: a condition of a question and prospective]*. NM-Oborudovanie. 2004. Vol.1. Pp.26-29.
9. Kabaldin Yu.G. *Samoorganizatsiya i nanostrukturnye protsessy pri rezanii [Self-organization and nanostructure processes when cutting]*. Gemany, Lambert Academic Publishing, 2012, 184 p.
10. Liu J., Ma C., Du H. *A comparative study of TiAlN and CrAlN coatings deposited on sialon ceramic cutting inserts by physical vapor deposition*. 2<sup>nd</sup> Intern. Conf. on Applied Mechanics, Electronics and Mechatronics Engineering (AMEME 2017), 2017, ISBN: 978-1-60595-497-4.
11. Chawla V. *Microstructural characteristics and mechanical properties of nanostructured and conventional TiAlN and AlCrN coatings on ASTM-SA210 grade A-1 boiler steel*. Hindawi Publishing Corporation, ISRN Corrosion, 2013, ID 231035, 14 p., <http://dx.doi.org/10.1155/2013/231035>.

12. Ovchinnikov E.V., Chekan N.M. *Mnogokomponentnye termostojkie plazmokhimicheskie pokrytiya [Multicomponent heat-resistant plasmochemical coatings]*. Progressivnye tekhnologii i sistemy mashinobudovaniya, 2014, Vol.2(48), Pp.3-9.
13. Chandrashekar A., Kabadi V.R., Bhide R. *Scratch wear resistance of TiAlN and AlCrN coated EN-353 steel*. Journal of Material. Science and Engineering, 2016, Vol.5, Pp.251(9).
14. Chim Y.C., Ding X.Z., Zeng X.T., Zhang S. *Oxidation resistance of TiN, CrN, TiAlN and CrAlN coatings deposited by lateral rotating cathode arc*. Thin Solid Films, 2009, Vol.517, Pp. 4845-4849.
15. Loktev D., Yamashkin E. *Osnovnye vidy iznosostojkikh pokrytij [Main types of wearproof coatings]*. Nanoindustriya, 2007, Vol.5, Pp.24-30.
16. Yan J.Y., Sun Y.D., Li D.J., Liu M.Y., Dong L., Cao M., Gao C.K., Wang N., Deng X.Y., Gu H.Q., Wan R.X., X. Sun *High-temperature stability of TiAlN/TiB<sub>2</sub> multilayers grown on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrates using IBAD*. Surface and Coatings Technology, 2013, Vol.229, Pp.105-108.
17. Chen H., Peng F., Mao H., Shen G., Liermann H.-P., Li Z., Shu J. *Strength and elastic moduli of TiN from radial X-ray diffraction under nonhydrostatic compression up to 45 GPa*. J. of Applied Physics, 2010, Vol.107, Pp.113503(5).
18. Shen P., Nose M., Fujii H., Nogi K. *Wettability of TiAlN films by molten aluminum*. Thin Solid Films, 2006, Vol.515, Pp.2009-2014.
19. Arya A., Carter E.A. *Structure, bonding, and adhesion at the TiC(100)/Fe(110) interface from first principles*. J. of Chemical Physics, 2003, Vol.118, Pp.8982-8996.
20. Lee J.H., Freeman A.J., Olson G.B. *Metal/ceramic adhesion at the Fe/TiN interface: Electronic and magnetic structure, and effect of S impurities*. <https://www.researchgate/publication/253515559>.
21. Lee J.-H., Shishidou T., Zhao Y.-J., Freeman A.J., Olson G.B. *Strong interface adhesion in Fe/TiC*. Philosophical Magazine, 2005, Vol.85, No.31, Pp.3683-3697.
22. Al Shafaay B., Abas S.R., Hashim A.S.K., Musa A.-A.O. *Structural, electronic and thermal properties of TiC compound in sodium chloride structure*. Iraq J. of Applied Physics, 2015, Vol.11(1), Pp.9-14.
23. Liu J.Z., van de Walle A., Ghosh G., Asta M. *Structure, energetics, and mechanical stability of Fe-Cu bcc alloys from first-principles calculations*. Physical Review B, 2005, Vol.72, Pp.144109(16).
24. Abrikosov I.A., Knutsson A., Alling B., Tasnadi F., Lind H., Hultman L., Oden M. *Phase stability and elasticity of TiAlN*. Materials, 2011, Vol.4, Pp.1599-1618.
25. Dudiy S.V. *Effect of Co magnetism on Co/TiC(001) interface adhesion: a first-principles study*. Surface Science, 2002, Vol.497, Pp.171-182.
26. Hung A., Yarovsky I., Muscat J., Russo S., Snook I., Watts R.O. *First-principles study of metallic iron interfaces*. Surface Science, 2002, Vol.501, Pp.261-269.
27. Kabaldin Yu.G., Vlasov E.E., Nemtsov Yu.Yu. *Vybor sostava i struktury pokrytij dlya rezhushhego instrumenta na osnove kvantovo-mekhanicheskikh raschetov [The choice of composition and structure of coatings for the cutting tool on the basis of quantum-mechanical calculations]*. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedinij. Mashinostroenie, 2015, Vol.9(666), Pp.52-58.
28. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. *Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamic*. Computational Physics Communications, 1997, Vol.107, Pp.187-205.

29. Zavodinsky V.G. *Ab initio study of the fcc-WC(100) surface and its interaction with cobalt monolayers*. Applied Surface Science, 2011, Vol.257, Pp.3581-3585.
30. Zavodinsky V.G. *Mekhanicheskie kharakteristiki nanorazmernykh prosloek kobal'ta v tverdykh splavakh WC/Co [Mechanical characteristics of nanodimensional layers of cobalt in hard alloys WC/Co]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii, 2011, Vol.17, No2, Pp.177-183.
31. Zavodinsky V, Kabaldin Y. *Investigation of Aluminum Based Composites Durability*. Intern. J. of Composite Materials, 2017, Vol.7(4), Pp.127-129.
32. Zavodinsky V, Kabaldin Y. *Influence of dopants on mechanical properties of steel: A spin-polarized pseudopotential study*. J. of Materials Science and Engineering, 2017, Vol.6, Pp.354, doi: 10.4172/2169-0022.1000354.
33. Hohenberg H, Kohn W. *Inhomogeneous electron gas*. Physical Review, 1964, Vol.136, Pp.B864-B871.
34. Kohn W., Sham J.L. *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*. Physical Review, 1965, Vol.140, Pp.A1133-A1138.
35. Cohen M.L., Heine V. *Pseudopotential theory of cohesion and structure*. In: Ehrenreich H, Seitz F, Turnbull D, editors. Solid State Physics, New York: Academic Pres, 1970, Vol.24, Pp.38-249.
36. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory*. Computational Physics Communications, 1999, Vol.119, Pp.67-165.
37. Perdew J.P., Wang Y. *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy*. Physical Review B, 1986, Vol.33, Pp.8800-8802.
38. Oura K., Lifshits V. G., Saranin A. A., Zotov A. V., Katayama M. *Vvedenie v fiziku poverkhnosti [Introduction to surface physics]*. Moskva, Nauka, 2006, 490 p.
39. Zavodinskij V.G., Kabaldin YU.G. *Kvantovo-mekhanicheskoe issledovanie vliyaniya primesej (C i P) na prochnostnye kharakteristiki ferrita ( $\alpha$ -Fe) [Quantum-mechanical study of the influence of impurities (C and P) on the strength characteristics of ferrite ( $\alpha$ -Fe)]*. Computational nanotechnology, 2017, No.1, Pp.36-38.
40. Liqiu Guo, Guomin Hua, Binjie Yang, Hao Lu, Lijie Qiao, Xianguo Yan, and Dongyang Li *Electron work functions of ferrite and austenite phases in a duplex stainless steel and their adhesive forces with AFM silicon probe*. Science Reports, 2016, 6: 20660, doi: 10.1038/srep20660.
41. Bazhanov D.I., Knizhnik A.A., Potapkin B.V. Bagaturyants A. *Impact of strain on the surface properties of transition metal carbide films: First-principles study*. J. of Applied Physics, 2010, Vol.107, Pp.083521.
42. Ryota Nakanishi, Shinsuke Kunitsugu, Koji Sueoka *First principles calculation on the surface energy of metal nitride with NaCl structure*. J. of the Surface Finishing Society of Japan, 2010, Vol.61(7), Pp.535(7).
43. Skriver H.L., Rosengaard N.M. *Surface energy and work function of elemental metals*. Physical Review B, 1992, Vol.46(11), Pp.7157-7168.

Поступила в редакцию 28 февраля 2018 года.

---

Сведения об авторах:

Заводинский Виктор Григорьевич – д.ф.-м.н., проф., в.н.с., ФГБУН Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия; e-mail: [vzavod@mail.ru](mailto:vzavod@mail.ru)  
 Кабалдин Юрий Георгиевич – д.т.н., проф., Нижегородский государственный технический университет, г. Нижний Новгород, Россия; e-mail: [uru.40@mail.ru](mailto:uru.40@mail.ru)