

## Методы решения проблемы кристаллохимического дизайна композиционных покрытий с антифрикционными свойствами

*И.В. Иванова, А.Н. Васильев, Н.В. Шишка*

*Акционерное общество «Особое конструкторско-технологическое бюро «Орион»*

**Аннотация:** Обсуждается взаимосвязь трибологических свойств композиционных покрытий со свойствами, структурой и характером распределения поверхностных фаз, а также механизм образования поверхностных фаз.

**Ключевые слова:** структура кристаллов, структурно-фазовая разупорядоченность, трибологические свойства поверхностных фаз, композиционные покрытия.

Развитие современной техники выдвигает новые требования к свойствам используемых материалов. В этом плане возможности простых материалов и покрытий практически исчерпаны. Как правило, значительно более эффективными оказываются композиционные материалы и покрытия модифицированные различными модификаторами. Однако современные модельные представления о механизмах формирования и образования поверхностных фаз хорошо развиты для простых соединений, но не учитывают целый ряд процессов, характерных для сложных систем. Ключевыми проблемами являются вопросы формирования многокомпонентных систем, процессы, происходящие на границах раздела, а также вопросы реализации фазовой и структурно-фазовой разупорядоченности в поверхностных слоях композиционных материалах и управление ими при помощи внешних воздействий. Способы структурирования и моделирования кристаллических материалов и их поверхности, а также возможность достижения в них качественно новых физико-химических свойств определяют сегодня прогресс во всех актуальных направлениях.

В соответствии с фундаментальной концепцией взаимосвязи «состав – структура – свойство» трибологические свойства композиционных покрытий определяются составом, структурой и трибологическими свойствами поверхностных фаз, характером их распределения на поверхности и в объеме

покрытия. Методы кристаллохимического конструирования структур поверхностных фаз и их изменений при трибовоздействии являются определяющими при решении проблемы кристаллохимического дизайна.

Основными задачами в рамках решения проблемы кристаллохимического дизайна являются: разработка теоретических основ влияния объемных и поверхностных структурных состояний композиционных материалов и покрытий на их трибологические свойства и изучение вероятных комплексных структурных состояний поверхности композиционных материалов и покрытий с учетом кристаллической и наноразмерной компонент.

Модульный дизайн структур кристаллов – перспективное направление кристаллохимического проектирования структур новых покрытий и материалов с повышенными технологическими характеристиками.

Однако применение методов модульного дизайна характеризующихся использованием нульмерных структурных модулей, а также модульных 3D структур, которые связаны с определенным структурным типом кристаллов общим структурным модулем, не всегда эффективно [1-5].

Метод комбинаторного модулярного дизайна 3D структур кристаллов [6,7] является наиболее перспективным для прогнозирования модулярных структур, генетически связанных с определенным структурным типом кристаллов общим структурным модулем. Этот метод может быть использован так же эффективно и для вывода вероятных модулярных 2D структур, модули которых удовлетворяют определенным топологическим условиям. Метод итерационного модулярного дизайна вероятных модулярных 2D структур, а также определенных фрактальных структур в 2D пространстве позволил существенно расширить представление о возможных структурных, кристаллохимических и информационных характеристиках эволюционного механизма образования поверхностных фаз [8,9].

---

При получении высокопрочных покрытий на железе, сталях и тугоплавких металлах используют композиции Me-X, где Me –Cr, Mo, W, Mn, Fe, Co, Ni, а X – B, P, Si [10]. Такие покрытия отличаются высокой износостойкостью, коррозионной стойкостью и прочностью сцепления с металлической основой. Эти свойства косвенно обусловлены специфическим состоянием поверхности композиционного материала. Проанализируем возможность реализации фазовой и структурно-фазовой разупорядоченности в поверхностных слоях композиционного материала на примере Me-B покрытий полученных методом химического осаждения.

Известно, что боридные покрытия на металлических поверхностях обладают высокой износостойкостью, коррозионной стойкостью, а также высокой адгезией к основному металлу.

В Me-B-покрытиях на сталях содержатся в основном две фазы: твердый раствор внедрения бора в металл и низкобористое соединение  $Me_4B$  или  $Me_3B$ . Они характеризуются низкой степенью кристалличности, которая закономерно увеличивается в процессе последующей термообработки. При трибомеханическом воздействии, сопровождающимся точечными деформациями и повышением температуры до  $1200^{\circ}C$ , в поверхностных слоях Me-B-покрытия могут одновременно происходить следующие процессы [11]:

- образование соединений с более высоким содержанием бора, обуславливающих переход:  $Me_3B \rightarrow 1/3 Me_2B + 1/3 Me \rightarrow 1/3 MeB + 2/3 Me$ , в результате которого реализуется состояние фазовой разупорядоченности;

- образование возможных наборов псевдофаз, характеризующихся структурной близостью к основной фазе и развитой сетью межфазных границ; при этом реализуется состояние структурно-фазовой разупорядоченности.

---

Для изучения структуры, механизма образования поверхностных фаз, влияющих на свойства композиционных покрытий и материалов весьма целесообразно применение подхода кристаллохимического дизайна с целью повышения технологических характеристик и увеличения эксплуатационных свойств композиционных покрытий. Моделирование структуры с применением метода комбинаторного модулярного дизайна и разработка теории деформационных фазовых превращений в композиционных покрытиях и материалах дает возможность для создания новых композиционных материалов и покрытий с заранее заданными свойствами.

Применение подхода кристаллохимического дизайна позволяет выявить и спрогнозировать влияние структурной составляющей на свойства получаемых покрытий и материалов, что в свою очередь способствует созданию новых с улучшенными физико-механическими свойствами.

### Литература

1. Смирнова Н.Л. Комбинаторный анализ кристаллов. // Кристаллография, 2004. Т.49. №4. С.628-633.
2. Shevchenko V.Ya., Mackay A.L. Geometrical Principles of the selfassembly of nanoparticles. // Glass Phys. Chem., 2008. V.34. N.1. pp.1-8.
3. Щербakov И.Н. О системном подходе к разработке композиционных антифрикционных покрытий // Инженерный вестник Дона. 2013. № 1 URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1567/.
4. O'Keeffe M., Eddaoudi M., Li H., Reineke T.M., Yaghi O.M. Frameworks for Extended Solids: Geometrical Design Principles. // J. Solid State Chem., 2000. V.152. pp.3-20.
5. Пьетронеро Л., Э. Тозатти Фракталы в физике. М.: Мир, 1988. 420с.
6. Иванов В.В., Таланов В.М. Комбинаторный модулярный дизайн шпинелеподобных фаз. // Физика и химия стекла, 2008. Т.34. №4. С.528-567.



7. Ivanov V.V., Talanov V.M. Modeling of the structure of the ordered spinel-like phases (of type 2:1). // Phys. Stat. Sol. (a). 1990. V.122. N.2. pp.109-112.

8. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных полигонных и полиэдрических наноструктур // Современные наукоемкие технологии, 2010. №10. С.176-179.

9. Иванов В.В., Демьян В.В., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн фрактальных структур в двумерном пространстве // Междунар. Журн. экспериментального образования, 2010. №11. С.153-155.

10. Иванова И.В., Шишка Н.В. Влияние ультрадисперсных модификаторов на антифрикционные свойства композиционных покрытий // Инженерный вестник Дона. 2017, № 4 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4544/.

11. Иванов В.В. Состояние структурно-фазовой разупорядоченности и свойства неорганических материалов // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Техн. науки, 2001.- №3.- С.60-61.

### References

1. Smirnova N.L. Kristallografiya. 2004. V.49. N4. Pp.628-633.
2. Shevchenko V.Ya., Mackay A.L. Glass Phys. Chem., 2008. V.34. N.1. pp.1-8.
3. Shcherbakov I.N. Inženernyj vestnik Dona (Rus). 2013. № 1. URL: ivdon.ru/magazine/archive/n1y2013/1567/.
4. O'Keeffe M., Eddaoudi M., Li H., Reineke T.M., Yaghi O.M. J. Solid State Chem., 2000. V.152. pp.3-20.
5. P'etronero L., EH. Tozatti Fraktaly v fizike [Fractals in physics]. M: Mir, 1988.420p.



6. Ivanov V.V., Talanov V.M. Fizika i himiya stekla. 2008. V.34. N4. pp.528-567.
7. Ivanov V.V., Talanov V.M. Phys. Stat. Sol.(a). 1990. V.122. N.2. pp109-112.
8. Ivanov V.V., SHabel'skaya N.P., Talanov V.M. Sovremennye naukoemkie tekhnologii. 2010. N10. pp.176-179.
9. Ivanov V.V., Dem'yan V.V., Talanov V.M. Mezhdunar. ZHurn. ehksperimental'nogo obrazovaniya. 2010. N11. pp.153-155.
10. Ivanova I.V., SHishka N.V. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus). 2017. № 4  
URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4544/](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4544/).
11. Ivanov V.V. Izv. vuzov. Sev.-Kavk. region. Tekhn. nauki.2001. N3.p.p.60-61.