

УДК 621.9.026

Разработка состава и структуры наноструктурных покрытий для режущего инструмента на основе квантово-механического моделирования

Ю.Г. Кабалдин, А.А. Башков, С.В. Иванов

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Developing the nanostructure coating composition and structure for cutting tools based on the quantum mechanical simulation

Y.G. Kabaldin, A.A. Bashkov, S.V. Ivanov

Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev

Рассмотрены физические основы прочности износостойких покрытий на базе квантово-механического моделирования. Рассчитаны атомные характеристики тугоплавких соединений, применяемых в качестве покрытий для твердосплавного режущего инструмента. Показано, что энергия адгезии известных покрытий TiC, TiN и TiAlN с железом и кобальтом достаточна для обеспечения надежного сцепления этих соединений с режущим инструментом при механической обработке сталей на основе железа.

EDN: MOWVR, <https://elibrary/mowvr>

Ключевые слова: износостойкие покрытия, режущий инструмент, твердые сплавы, квантово-механические расчеты, уровень Ферми тугоплавких соединений, прочность адгезии

The paper considers physical foundations of the wear-resistant coating strength based on the quantum mechanical simulation. Atomic characteristics are computed for a number of refractory compounds used as the carbide cutting tool coatings. The paper shows that adhesion energy of the known TiC, TiN and TiAlN coatings with iron and cobalt is sufficient to ensure reliable adhesion of these compounds to the cutting tool in mechanical processing of the iron-based steels.

EDN: MOWVR, <https://elibrary/mowvr>

Keywords: wear-resistant coating, cutting tool, carbide, quantum mechanical computation, refractory compounds Fermi level, adhesion strength

Износостойкие покрытия находят широкое применение в машиностроительной промышленности [1]. В последние годы разрабатываются наноструктурные покрытия. Однако в литературе отсутствуют экспериментальные подтверждения наноструктурного характера их осаждения на режущем инструменте (РИ) и об их эффективном применении.

Цель исследования — разработка научных подходов к оптимизации и оценке составов и

структуры наноразмерных покрытий для повышения износостойкости РИ при механической обработке.

Развитие нанотехнологий и переход к созданию новых материалов на основе наноразмерных структур вызывает необходимость совершенствования методов компьютерного моделирования процессов зарождения и роста наночастиц и наноразмерных пленок при их осаждении на РИ. Одним из перспективных

подходов к решению этой проблемы является квантово-механическое моделирование [2, 3].

Карбид (TiC) и нитрид (TiN) титана — одни из первых видов износостойких покрытий РИ [1]. Структуры объемных (массивных) TiC, TiN и других тугоплавких соединений хорошо известны [4]. К сожалению, по справочным данным указанные параметры сильно различаются.

Пространственные (сферические) конфигурации наночастиц TiN размером 3 и 5 нм, полу-

ченные путем квантово-механического моделирования [2, 3], приведены на рис. 1. Выполнены расчеты распределения плотности электронных состояний (ПЭС) наночастиц TiN по энергии адгезии, а также их модуля упругости. Распределение ПЭС наночастиц TiN размером 3 и 5 нм по энергии адгезии показано на рис. 2.

Все построенные зависимости ПЭС от энергии адгезии выглядят похожими на таковую для ПЭС массивного TiN, показанную на рис. 3 и имеющую энергию (уровень) Ферми около 2эВ. Можно предположить, что их сходство обусловлено природой связей атомов Ti и N в наночастицах сферической формы с таким же типом связей, как и в массивном TiN. Значения уровня Ферми наночастиц и объемного TiN приведены в табл. 1, где ОНТ — объемный нитрид титана.

Из табл. 1 следует, что с увеличением числа пар атомов титана и азота уровень Ферми наночастиц сначала возрастает, затем интенсивность его роста снижается, но остается значительно выше, чем в массивном нитриде титана. Таким образом, анализ результатов расчета

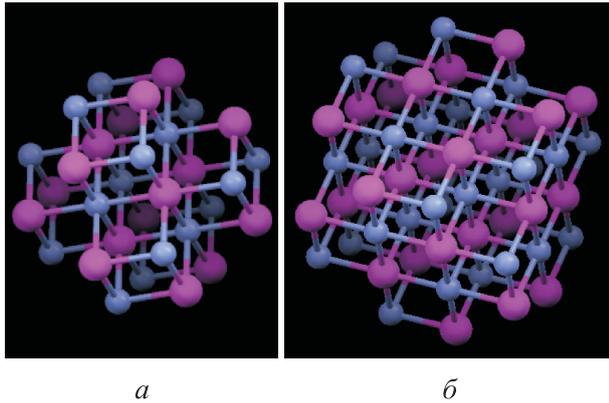


Рис. 1. Пространственные конфигурации наночастиц TiN размером 3 (а) и 5 нм (б)

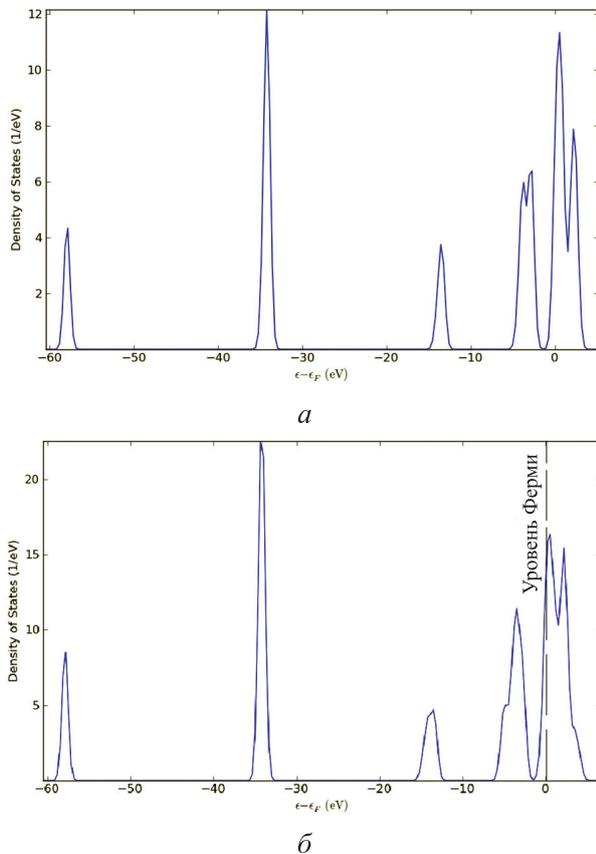


Рис. 2. Распределение ПЭС наночастиц TiN размером 3 (а) и 5 нм (б) по энергии адгезии

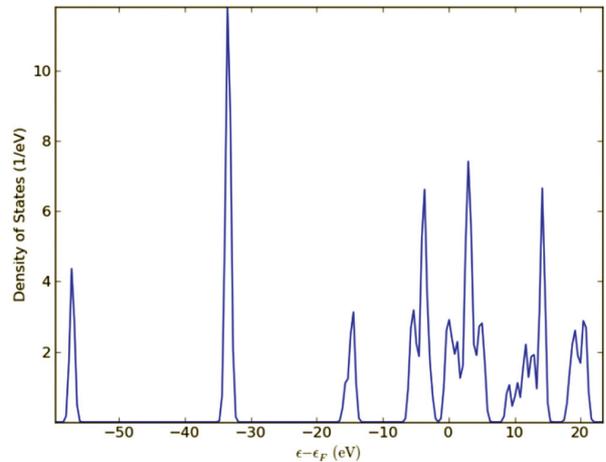


Рис. 3. Распределение ПЭС массивного TiN по энергии адгезии

Таблица 1
Значения уровня Ферми наночастиц и объемного TiN

Размер наночастицы, нм	Уровень Ферми, эВ
3	4
5	10
7	16
10	18
ОНТ	2

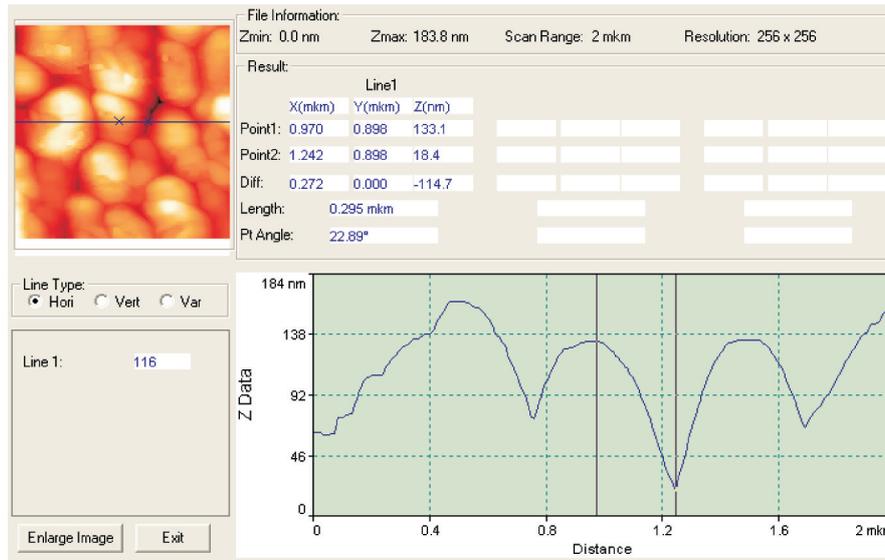


Рис. 4. Микрофотография поверхности покрытия TiC, выполненная на АСМ

Таблица 2

Значения среднего размера зерен покрытия TiC

Номер опыта	Средний размер зерен, нм	Номер опыта	Средний размер зерен, нм
1	108,783 ± 25,4139	5	87,9751 ± 23,0095
2	109,854 ± 23,6519	6	121,329 ± 33,9559
3	119,187 ± 27,6264	7	82,9257 ± 21,9689
4	158,355 ± 42,7512	8	149,787 ± 30,5775

уровня Ферми наночастиц показал их преимущество перед массивным нитридом титана.

Модуль упругости, рассчитанный для наночастицы TiN размером 10 нм, составил 620 ГПа, что значительно больше, чем у массивного TiN [4].

Проведенные расчеты атомных и механических характеристик выявили преимущество наночастиц перед массивным нитридом титана, в связи с чем важно реализовывать наноструктурное состояние в покрытиях, предназначенных для широкой номенклатуры РИ [5, 6].

Как показали исследования, механизм конденсации атомов материала на РИ (подложку) подчиняется нормальному закону. Основная масса конденсирующегося материала поступает в перпендикулярном к подложке направлении, поэтому пленки имеют как столбчатую структуру, так и зернистую. Диаметр частиц составлял 20...70 нм, что придавало покрытиям особые функции, в частности обладание квантовыми свойствами.

Структуру покрытий исследовали с помощью двух микроскопов — сканирующего элек-

тронного фирмы JEOL и атомно-силового (АСМ) SMENA компании NT-MDT.

Микрофотография поверхности покрытия из TiN, полученного путем осаждения на режущие пластины из твердого сплава BK8 методом КИБ, приведена на рис. 4, а значения среднего размера зерен — в табл. 2. Размер частиц отличается от такового для частиц в потоке плазмы. Максимальный размер отдельных частиц превышал 100 нм. В процессе опытов выявлена зависимость размера зерен от времени их осаждения на поверхности подложки из твердого сплава.

В ходе проведенных исследований найдены оптимальные режимы образования нанопокровов, исследованы условия их получения. Установлено, что метод формирования наночастиц в плазме позволяет получать потоки частиц менее 5 нм с узким спектром их распределения по размерам. Замечена роль теплообмена в формировании наночастиц.

Дисперсность верхнего слоя покрытия, на который осаждается последующий атомный слой, зависит от его толщины, которая обуслов-

ливаает особенность теплоотвода. В результате наночастицы нижнего слоя, на который происходит осаждение, объединяются в конгломераты и при большой толщине образуют сплошную пленку. Дисперсность пленки в зависимости от толщины покрытия меняется. Поэтому температура и время осаждения являются факторами управления дисперсностью покрытия.

Моделируя процессы зарождения и динамику роста наночастиц на подложке, а также выполняя квантово-механические расчеты, можно предсказать структуру наноразмерной пленки и подобрать такие параметры системы, при которых будут получены нужные функциональные свойства покрытия. Поэтому с практической точки зрения представляет интерес оценка прочности как самого наноразмерного покрытия, так и его сцепления с твердосплавной основой [3].

Наряду с исследованиями технологии осаждения наноструктурных покрытий исследована зависимость стойкости РИ от атомных и электронных свойств частиц покрытий. Как уже отмечалось, важными параметрами свойств наночастиц и массивного тугоплавкого материала являются уровень Ферми и температура сверхпроводимости как квантовые свойства тугоплавких частиц [3].

Для подтверждения этого построены зависимости уровня Ферми от температуры сверхпроводимости различных тугоплавких соединений, применяемых в качестве покрытий, в частности карбидов и нитридов по справочным данным, которые, как уже указывалось, обладают большим разбросом, вследствие того, что выполнены в разных условиях. Тем не менее на

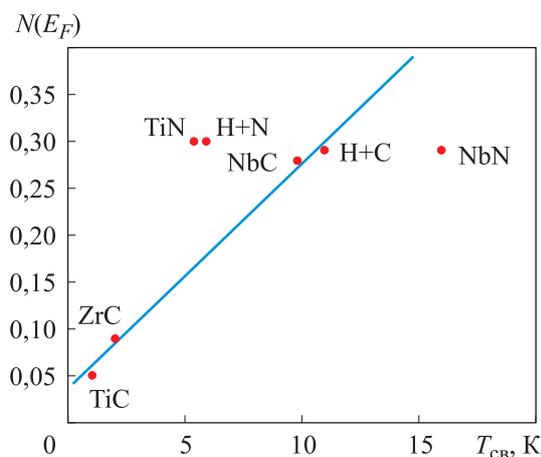


Рис. 5. Зависимость уровня Ферми $N(E_F)$ от температуры сверхпроводимости $T_{св}$ тугоплавких соединений

рис. 5 видно, что у карбидов переходных металлов температура сверхпроводимости $T_{св}$ ниже, чем у бинарных нитридов. Наибольшие значения температуры сверхпроводимости имеют нитриды ниобия [7, 8]. Линия показывает, что с увеличением температуры ПЭС возрастает.

Уровень Ферми — максимальное значение энергии, которое может иметь электрон при температуре абсолютного нуля. Энергия Ферми совпадает со значениями химического потенциала газа фермионов при температуре $T = 0$ К, т. е. уровень Ферми для электронов выступает в качестве уровня химического потенциала для незаряженных частиц. Соответствующий ей потенциал называют электрохимическим. Таким образом, уровнем Ферми в металлах является энергия, которой может обладать электрон при температуре абсолютного нуля [4].

Положение уровня Ферми является одной из основных характеристик состояния электронов (электронного газа) в твердом теле. В квантовой теории вероятность заполнения энергетического состояния электронами определяется функцией Ферми.

Известно [8], что кубические нитриды ванадия, ниобия и тантала являются сверхпроводниками с довольно высоким значением температуры $T_{св}$. Это объясняется высокой ПЭС на уровне Ферми и довольно большим значением константы электрон-фононного взаимодействия и, возможно, размягчением фононных мод вследствие наличия плоскопараллельных участков поверхности Ферми (нестинга). Увеличение числа валентных электронов, т. е. переход к нитридам $Me^{VI}N$ (Cr, Mo, Nb) при условии сохранения типа кристаллической структуры приводит к сдвигу уровня Ферми в область еще более высоких ПЭС, что может повлечь за собой дальнейшее повышение температуры $T_{св}$. Это обуславливает повышенный интерес исследователей к нитридам металлов подгруппы VIA [1, 2, 5, 6].

Таким образом, атомные и электронные характеристики могут быть удобным критерием для поиска потенциально перспективных материалов с высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние [4].

Зависимость стойкости РИ при резании покрытий разного состава от уровня Ферми приведена на рис. 6. Толщина покрытий составляла 3 мкм. Режимы резания: скорость $v = 90$ м/мин, глубина $t = 2$ мм и подача на оборот $S_o = 0,21$ мм/об. Обрабатываемым материалом яв-

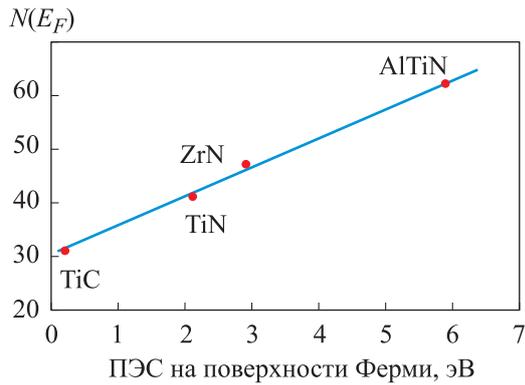


Рис. 6. Зависимость стойкости РИ от ПЭС на поверхности Ферми различных тугоплавких соединений

лялась сталь X18H9T. Линия показывает, что с увеличением ПЭС стойкость РИ возрастает.

Как видно из рис. 6, чем выше уровень Ферми тугоплавкого соединения, используемого в качестве покрытия, тем выше стойкость РИ.

Поверхностная структура покрытия (TiAl)N, выполненная на АСМ, приведена на рис. 7, а расчетные значения среднего размера зерен — в табл. 3. Видно, что двухэлементное покрытие (TiAl)N имеет меньший размер зерен (60... 80 нм), чем одноэлементное TiN (см. рис. 5), что

обусловило повышение износостойкости (рис. 6). Моделирование распределения ПЭС по энергии адгезии также показало, что у двухэлементного покрытия уровень Ферми выше, чем у одноэлементного. Таким образом, одним из путей получения наноразмерных покрытий для РИ является разработка многоэлементных составов.

Зависимость уровня Ферми от стехиометрического состава карбида ниобия, построенная по справочным данным [4, 7, 8], приведена на рис. 8. Видно, что отсутствие дефектов (вакансий) прежде всего в углеродной подрешетке будет влиять на атомные характеристики тугоплавких соединений, а, следовательно, и на стойкость РИ. Как показали расчеты, полная энергия, в частности карбида вольфрама WC, формируется d-электронами металлической подрешетки, s- и p-электронами углеродной подрешетки. Из рис. 8 следует, что с увеличением содержания углерода ПЭС возрастает, т. е. нестехиометрия карбидов снижает плотность, а, следовательно, и их твердость.

В связи с этим проведен расчет полной энергии различных элементов, которые можно использовать в качестве мишени (катодов) при

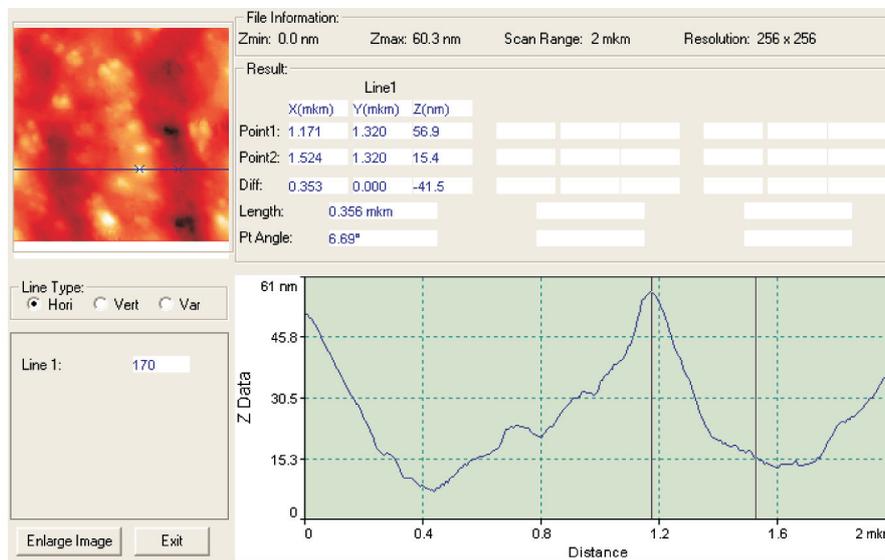


Рис. 7. Поверхностная структура покрытия (Ti, Al)N, выполненная на АСМ

Таблица 3

Значения среднего размера зерен покрытия (Ti, Al)N

Номер опыта	Средний размер зерен, нм
1	60,7412 ± 14,5567
2	87,5158 ± 21,9893
3	69,4618 ± 15,3346

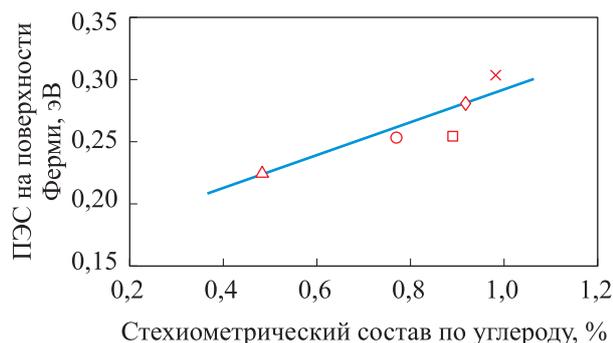


Рис. 8. Зависимость ПЭС на поверхности Ферми от стехиометрического состава по углероду карбида ниобия 0,48 (Δ), 0,77 (○), 0,89 (□), 0,91 (◇) и 0,98 (×)

магнетронном и ионно-плазменном напылении покрытий в среде реактивного газа. Анализ результатов расчета показал, что наибольшей общей энергией обладают ниобий и молибден, имеющие сравнительно высокие значения температуры сверхпроводимости [4].

Также при моделировании оценивали взаимную растворимость элементов, из которых выполнены катоды, т. е. моделировали различные двух- и трехэлементные системы и рассчитывали их общую энергию. В частности, исследовали системы Ti–Al, Ti–Cr, Ti–Mo–Zr, Mo–Zr–Cr и т. д. При этом общую энергию рассматривали в качестве критерия прочности межатомного взаимодействия. Установили, что трехэлементные составы имеют большую прочность межатомного взаимодействия, чем двухэлементные.

Известно [7], что взаимная растворимость элементов, обеспечивается перекрытием валентных (внешних) электронов и размерным фактором. Выявлено, что наибольший вклад в общую энергию указанных систем вносят d-электроны. Полагаем, что общая энергия будет определять прочность межатомного взаимодействия и устойчивость структурного состояния указанных систем (кластеров).

Как показали расчеты, общая энергия твердого сплава системы WC–Co, составила –78,84 а.е. (атомных единиц), т. е. эта она является устойчивой. Известно, что вследствие хорошей растворимости кобальт с карбидом вольфрама неплохо смачивает зерна WC. В результате хрупкая прочность, например, твердого сплава VK8 оказывается высокой.

Проведенные исследования, позволили разработать научный подход к оптимизации составов и структуры наноструктурных покрытий с заданными свойствами. В частности, модели-

рование многоэлементных, двух- и трехслойных нанопокровтий показало рост уровня Ферми. Следовательно, температура сверхпроводимости одноэлементных нитридов достигается путем введения в их состав тугоплавких элементов, таких как Mo, Hf, Zr, Nb, Ta и т. д.

В результате квантово-механических расчетов и экспериментальных исследований разработаны научные принципы, которые необходимо соблюдать при осаждении многослойных наноструктурных покрытий. При осаждении многослойных покрытий нижний слой покрытия должен обладать высокой адгезией с подложкой, а верхний слой — низкой адгезией с обрабатываемым материалом.

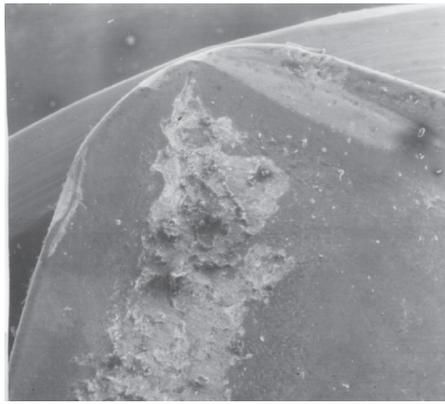
Поэтому в качестве слоев верхних слоев покрытий следует назначать элементы с высоким уровнем Ферми, а в качестве нижних — с более низким. Как уже указывалось, при назначении нижних слоев покрытия критерием выбора для квантово-механических расчетов является общая энергия систем Co–нитрид. Анализ результатов расчета показал, что в твердых сплавах [9] при взаимодействии с элементами покрытия наиболее физически и химически активен кобальт.

В связи с этим на основе квантово-механических расчетов сделан выбор однослойных покрытий при резании железоуглеродистых сталей.

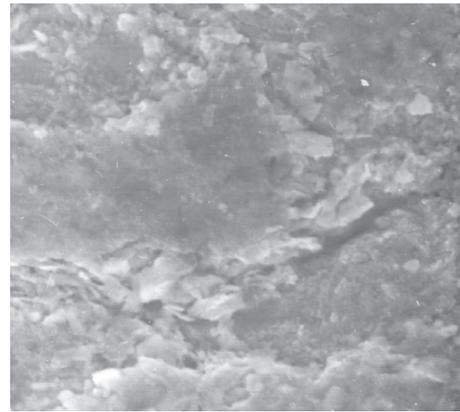
Однослойные покрытия TiC, TiN и TiAlN широко применяют [1] для повышения эффективности РИ при механообработке различных железоуглеродистых и нержавеющей сталей, жаропрочных сплавов и т. д. Экспериментальному исследованию их механических свойств посвящено огромное количество публикаций, общее представление о которых можно получить, например, в работах [1, 5, 6].

Поскольку речь идет о покрытиях, предназначенных для повышения эффективности РИ, была поставлена задача оценить сопротивление их сдвиговым нагрузкам, т. е. вычислить модуль сдвига, так как он в значительной степени определяет рабочие характеристики покрытий под воздействием высоких контактных нагрузок при резании.

Другой важной характеристикой изучаемых систем, как уже указывалось, является энергия адгезии покрытия с твердосплавной подложкой, поскольку покрытие должно удерживаться на РИ и не отрываться от него при резании. Очевидно, что она должна быть сопоставима



а



б

Рис. 9. Микрофотографии разрушения покрытия TiN на твердосплавном РИ:
а — разрушение покрытия по передней поверхности (при увеличении $\times 100$);
б — отрыв частиц покрытия (при увеличении $\times 1000$)

с энергией отрыва зерен железа друг от друга (около $1,4 \dots 4,7$ Дж/м²).

Таким образом, при осаждении на твердосплавную основу (систему WC-Co) частицы покрытий в основном взаимодействуют с кобальтовой фазой, что выражается в островковом сцеплении покрытия с подложкой и проявляется в его очаговом изнашивании при резании (рис. 9). Поэтому важно исследовать адгезию покрытий с кобальтом.

Все описанные расчеты проводили с помощью программного пакета FHI96spin, являющегося модификацией пакета FHI96md [1], ранее успешно использованного для изучения механических свойств многих наносистем, в том числе содержащих TiC, TiN и TiAl, Fe и Co. Этот пакет основан на спин-поляризованной версии теории функционала плотности, методе псевдопотенциала и наборе плоских волн. Использовали псевдопотенциалы, построенные с помощью пакета FHI98PP.

Согласно программному пакету расчета, 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 применяли кристаллы TiC, TiN и TiAlN. Основу обрабатываемого металла или РИ моделировали слоями железа или кобальта.

Кристаллическая структура α -феррита представляет собой объемно центрированную решетку со стороной $0,2867$ нм. Расчетная постоянная решетки составляла $0,288$ нм. Карбид и нитрид титана имеют кубическую решетку типа

NaCl со сторонами $0,433$ и $0,424$ нм соответственно.

Для исследуемых систем получены следующие значения энергии адгезии на поверхности α -феррита, Дж/м²: TiC-Fe — $3,73$; TiN-Fe — $4,16$, TiAlN-Fe — $3,68$.

Эти результаты удовлетворительно согласуются с данными, полученными на основе экспериментальных исследований в работе [4]. Что касается энергии адгезии покрытия TiAlN с железом, то такие литературные данные не найдены. Можно считать, что в пределах неизбежных погрешностей расчеты для всех рассмотренных покрытий дают одно и то же значение (около 4 Дж/м²).

Как уже указывалось, максимальная энергия разрыва границы зерен в железе равна $4,7$ Дж/м² [2], т. е. проведенные расчеты подтверждают, что такие покрытия имеют наибольшую адгезию со стальным РИ.

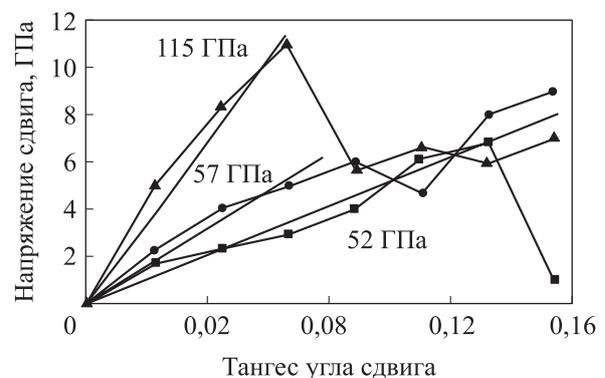


Рис. 10. Зависимости напряжения сдвига от тангенса угла сдвига для исследованных покрытий на кобальте TiC (—■—), TiN (—●—) и TiAlN (—▲—)

Таблица 4

Значения энергии адгезии и модуля сдвига для исследованных систем покрытие–подложка

Покрытие	Подложка	Энергия адгезии, Дж/м ²	Модуль сдвига, ГПа
TiC	Fe	3,73/2,56	63,0/49,8
	Co	4,10/2,57...2,80	52,0/49,8
TiN	Fe	4,16/3,79	68,0/–
	Co	3,66/–	57,0/–
TiAlN	Fe	3,68/–	120,0/–
	Co	3,47/–	115,0/–

Примечание. В числителе дроби указаны результаты расчета, в знаменателе — данные для массивного материала [4].

Для систем на основе кобальте получены следующие значения энергии адгезии покрытий, Дж/м²: TiC–Co — 4,10; TiN–Co — 3,66; TiAlN–Co — 3,47. Анализ полученных данных показывает, что значения энергии адгезии на кобальте близки к таковым для случая, когда в качестве подложки выступает железо. Следовательно, такие покрытия должны иметь хорошее сцепление с РИ (подложкой на основе твердых сплавов WC–Co).

Реакция покрытий на кобальте на сдвиговые деформации, где тонкие прямые линии указывают среднее направление производной, по которой находили значение модуля сдвига G , показана на рис. 10. Для наглядности расчетные точки соединены линиями. Видно, что значения модуля сдвига для покрытий TiC, TiN и TiAlN на кобальте несколько ниже, чем у таковых на железе. По-видимому, это связано с тем, что в упругие свойства системы покрытие–подложка вносит вклад не только покрытие, но и подложка, а модуль сдвига железа (82 Дж/м²) больше, чем у кобальта (75 Дж/м²). Как и на железной подложке, на кобальте выполняется соотношение

$$G_{\text{TiC-Co}} < G_{\text{TiN-Co}} < G_{\text{TiAlN-Co}},$$

где $G_{\text{TiC-Co}}$, $G_{\text{TiN-Co}}$ и $G_{\text{TiAlN-Co}}$ — модуль сдвига систем TiC–Co, TiN–Co и TiAlN–Co соответственно.

Суммарные результаты всех расчетов и данные для массивного материала, полученные в работе [4], приведены в табл. 4.

Таким образом, энергия адгезии покрытий TiC, TiN и TiAlN с железом и кобальтом, состав-

вившая 3,5...4,1 Дж/м², является достаточной для обеспечения их надежного сцепления с РИ при резании.

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 наблюдался у карбида титана вследствие высокой энергии адгезии с кобальтом, т. е. со структурной составляющей твердых сплавов. Однако наибольший модуль сдвига оказался у покрытия TiAlN. Поэтому наряду с более мелким размером зерна и более высоким уровнем Ферми покрытие TiAlN обеспечивает наибольшую стойкость РИ [1].

Выводы

1. Показано, что квантово-механические расчеты позволяют количественно оценивать энергию адгезии покрытий со стальной и твердосплавной основами. Это открывает перспективы научного подхода к разработке новых составов и структуры покрытий для твердосплавного РИ.

2. На основе квантово-механических расчетов и разработанных принципов, предложены эффективные составы наноструктурных покрытий [6, 10].

3. Отмечено, что применение нанотехнологии [11–13] при металлообработке широкой номенклатуры материалов дает возможность повысить производительность этого процесса.

Литература

- [1] Верещака А.С., Третьяков И.П. *Режущие инструменты с износостойкими покрытиями*. Москва, Машиностроение, 1986. 190 с.
- [2] Заводинский В.Г. *Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем*. Москва, Физматлит, 2013. 174 с.
- [3] Заводинский В.Г., Кабалдин Ю.Г. Модуль сдвига и энергия адгезии нанопокровтий, используемых при производстве режущих инструментов. *Механика композиционных материалов*, 2018, т. 24, № 2, с. 207–220, doi: https://doi.org/10.25590/mkmk.ras.2018.24.02.187_220.04
- [4] Косолапова Т.Я., ред. *Свойства, получение и применение тугоплавких соединений*. Москва, Металлургия, 1986. 927 с.
- [5] Кабалдин Ю.Г. *Структура, прочность и износостойкость композиционных материалов*. Владивосток, Дальнаука, 1996. 183 с.
- [6] Кабалдин Ю.Г., Серый С.В. Оптимизация составов и функциональных свойств наноструктурных покрытий для режущего инструмента методом функционала электронной плотности. *Вестник машиностроения*, 2011, № 5, с. 49–54.
- [7] Цирельсон В.Г. *Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела*. Москва, Бином. Лаборатория знаний, 2010. 495 с.
- [8] Ивановский А.Л., Жуков В.П., Губанов В.А. *Электронное строение тугоплавких карбидов и нитридов переходных металлов*. Москва, Наука, 1990. 220 с.
- [9] Чапорова И.Н., Чернявский К.С. *Структура твердых сплавов*. Москва, Металлургия, 1975. 248 с.
- [10] Кабалдин Ю.Г. Синергетика. *Информационные модели самосборки наносистем и наноструктурирования материалов при внешних механических воздействиях*. Комсомольск-на-Амуре, КНАГТУ, 2007. 184 с.
- [11] Кобаяси Н. *Введение в нанотехнологию*. Москва, Бином. Лаборатория знаний, 2008. 134 с.
- [12] Елисеев А.А., Лукашин А.В. *Функциональные наноматериалы*. Москва, Физматлит, 2010. 452 с.
- [13] Воронов В.К., Подоплелов А.В., Сагдеев Р.З. *Физика на переломе тысячелетий. Физические основы нанотехнологий*. Москва, Либроком, 2011. 432 с.

References

- [1] Vereshchaka A.S., Tretyakov I.P. *Rezhushchie instrumenty s iznosostoykimi pokrytiyami* [Cutting tools with wear-resistant coatings]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1986. 190 p. (In Russ.).
- [2] Zavodinskiy V.G. *Kompyuternoe modelirovanie nanochastits i nanosistem* [Computer modeling of nanoparticles and nanosystems]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2013. 174 p. (In Russ.).
- [3] Zavodinskiy V.G., Kabaldin Yu.G. Shear module and adhesion energy of nanocoatings used for cutting tools. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of Composite Materials and Structures], 2018, vol. 24, no. 2, pp. 207–220, doi: https://doi.org/10.25590/mkmk.ras.2018.24.02.187_220.04 (in Russ.).
- [4] Kosolapova T.Ya., ed. *Svoystva, poluchenie i primeneniye tugoplavkikh soedineniy* [Properties, preparation and application of refractory compounds]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1986. 927 p. (In Russ.).
- [5] Kabaldin Yu.G. *Struktura, prochnost i iznosostoykost kompozitsionnykh materialov* [Structure, strength and wear resistance of composite materials]. Vladivostok, Dalnauka Publ., 1996. 183 p. (In Russ.).
- [6] Kabaldin Yu.G., Seryy S.V. Optimizing the composition and properties of nanostructural coatings for cutting tools on the basis of the electron-density functional. *Vestnik mashinostroeniya*, 2011, no. 5, pp. 49–54. (In Russ.). (Eng. version: Russ. Engin. Res., 2011, vol. 31, no. 5, pp. 458–464, doi: <https://doi.org/10.3103/S1068798X11050078>)
- [7] Tsirelson V.G. *Kvantovaya khimiya. Molekuly, molekulyarnye sistemy i tverdye tela* [Molecules, molecular systems and solids]. Moscow, Binom. Laboratoriya znaniy Publ., 2010. 495 p. (In Russ.).

- [8] Ivanovskiy A.L., Zhukov V.P., Gubanov V.A. *Elektronnoe stroenie tugoplavkikh karbidov i nitridov perekhodnykh metallov* [Electronic structure of refractory carbides and nitrides of transition metals]. Moscow, Nauka Publ., 1990. 220 p. (In Russ.).
- [9] Chaporova I.N., Chernyavskiy K.S. *Struktura tverdykh splavov* [Structure of hard alloys]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1975. 248 p. (In Russ.).
- [10] Kabaldin Yu.G. Sinergetika. *Informatsionnye modeli samosborki nanosistem i nanostrukturirovaniya materialov pri vneshnikh mekhanicheskikh vozdeystviyakh* [Information models of self-assembly of nanosystems and nanostructuring of materials under external mechanical actions]. Komsomolsk-na-Amure, KnAGTU Publ., 2007. 184 p. (In Russ.).
- [11] Kobayasi N. *Vvedenie v nanotekhnologiyu* [Introduction to nanotechnology]. Moscow, Binom. Laboratoriya znaniy Publ., 2008. 134 p. (In Russ.).
- [12] Eliseev A.A., Lukashin A.V. *Funktsionalnye nanomaterialy* [Functional nanomaterials]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 452 p. (In Russ.).
- [13] Voronov V.K., Podoplelov A.V., Sagdeev R.Z. *Fizika na perelome tysyacheletiy. Fizicheskie osnovy nanotekhnologiy* [Physics at the turn of the millennium. Physical bases of nanotechnologies]. Moscow, Librokom Publ., 2011. 432 p. (In Russ.).

Статья поступила в редакцию 29.01.2024

Информация об авторах

КАБАЛДИН Юрий Георгиевич — заслуженный деятель науки и техники РФ, доктор технических наук, профессор кафедры «Технология и оборудование машиностроения». Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева (603155, Нижний Новгород, Российская Федерация, ул. Минина, д. 24, e-mail: uru.40@mail.ru).

БАШКОВ Андрей Алексеевич — аспирант кафедры «Технология и оборудование машиностроения». Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева (603155, Нижний Новгород, Российская Федерация, ул. Минина, д. 24, e-mail: kicliu@mail.ru).

ИВАНОВ Сергей Владимирович — аспирант кафедры «Технология и оборудование машиностроения». Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева (603155, Нижний Новгород, Российская Федерация, ул. Минина, д. 24, e-mail: ivanov.serega.2016@mail.ru).

Information about the authors

KABALDIN Yuriy Georgievich — Honored Scientist of the Russian Federation, Doctor of Science (Eng.), Professor, Department of Machine Building Technology and Equipment. Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev (603155, Nizhny Novgorod, Russian Federation, Minin St., Bldg. 24, e-mail: uru.40@mail.ru).

BASHKOV Andrey Alekseevich — Postgraduate, Department of Machine Building Technology and Equipment. Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev (603155, Nizhny Novgorod, Russian Federation, Minin St., Bldg. 24, e-mail: kicliu@mail.ru).

IVANOV Sergey Vladimirovich — Postgraduate, Department of Machine Building Technology and Equipment. Nizhny Novgorod State Technical University named after R.E. Alekseev (603155, Nizhny Novgorod, Russian Federation, Minin St., Bldg. 24, e-mail: ivanov.serega.2016@mail.ru).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Кабалдин Ю.Г., Башков А.А., Иванов С.В. Разработка состава и структуры наноструктурных покрытий для режущего инструмента на основе квантово-механического моделирования. *Известия высших учебных заведений. Машиностроение*, 2024, № 10, с. 44–53.

Please cite this article in English as:

Kabaldin Y.G., Bashkov A.A., Ivanov S.V. Developing the nanostructure coating composition and structure for cutting tools based on the quantum mechanical simulation. *BMSTU Journal of Mechanical Engineering*, 2024, no. 10, pp. 44–53.