

БАЙМОЛДАНОВА ЛАЗАТ САРҚЫТБЕКҚЫЗЫНЫҢ
«Нанокомпозитті (TiAlSiY)N/CrN жабындарының
микроқұрылымына, механикалық және трибологиялық қасиеттеріне Au⁺
иондарымен импланттаудың әсері» тақырыбындағы
6D072300 – «Техникалық физика» мамандығы бойынша философия
докторы (PhD) дәрежесін алу үшін дайындаған диссертациясына
АҢДАТПА

Диссертациялық жұмыс вакуумды-доғалы тұндыру әдісімен алынған, кейіннен энергиясы 60 кэВ және дозасы $1 \cdot 10^{17}$ см⁻² болатын Au⁺ иондарымен имплантталған наноқабатты құрылымы бар (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі нанокомпозитті жабындардың эксперименттік және теориялық зерттеулеріне арналған. Жұмыста (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі нанокомпозитті жабындардың құрылымды-фазалық күйіне, физика-механикалық, трибологиялық және антибактериалдық қасиеттеріне Au⁺ иондарымен импланттаудың әсерін зерттеудің, сонымен қатар молекулалық динамика негізіндегі теориялық есептеулердің нәтижелері келтірілген.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. Көпкомпонентті және көпэлементті нитридті жабындар жоғары жанасу жүктемелерімен жұмыс жасайтын механизмдердің беріктілігін, абразивті және коррозиялық төзімділіктерін жоғарылату, олардың триботехникалық сипаттамаларын жақсарту үшін кеңінен қолданылады. Соңғы жылдары жылулық тұрақтылыққа, жоғары қаттылық пен коррозиялық төзімділікке ие үштік TiAlN нитридті қосылысы кеңінен қолданыс тауып отыр. Алайда, осындай жабындар түріне қойылатын талаптар артып келеді. Олар жоғары температура мен жүктемелерге төтеп бере алатын, үйкеліс коэффициенті төмен және тозуға төзімділігі жеткілікті болуы тиіс. Осылайша, жақсартылған қасиеттері бар жаңа жабындарды алудың өзектілігі айтарлықтай өсті.

Соңғы уақыттарда комбинациясы өзгермелі Ti_{1-x}Al_xSiN (Me-ауыспалы металл) негізіндегі көпқабатты композитті құрылым 50 ГПа дейінгі наноқаттылықты, сонымен бірге пластикалық және термиялық кернеулерге қарсы тұра алатын жетілдірілген құрылым ретінде өзін көрсете алып отыр. Босаңсу (релаксация) процесі кезінде беткі деформация энергиясы әсеріне сәйкес аймақтық кернеулер концентрациясы мен таралуын анықтайтын төсеніште жабын дислокациялық құрылым түзеді.

Сонымен қатар, иондық импланттау нәтижесінде алынған нанокомпозитті материалдардағы көпқабатты бөліну шекараларының түзілуі құрылымды өзгертуге, қатты денелердің механикалық, химиялық, электрлік, трибологиялық және басқа да қасиеттерін айтарлықтай өзгертуге мүмкіндік береді. Сондай-ақ, үдетілген иондарды қолдану ендіретін легірлеуші элементтің қажет концентрациясын және оның беттік аймағында тереңдік бойынша таралу сипатын алуға көмектеседі.

Иондық импланттау – қатты денелердің беттік қабаттарын легірлеу және модификациялауға арналған әмбебап құрал. Әдістің бірден-бір артықшылығы легірленген қабат қалыңдығының аздығы, беттің кедір бұдырлығы, адгезияға

және әсерлесу бөлігіне тәуелсіздігі (материал тереңдігінде қалдықсыз кернеумен), сондай-ақ нәтижелердің жақсы жаңғыртылуы болып табылады. Au⁻ сияқты ауыр иондармен импланттау иондардың өзара әрекеттесуі мен енуінің және кейінгі радиациялы-үдетілген диффузияның нәтижесінде жергілікті ақаулар пайда болатын каскадтар мен аймақтардың жоғары тығыздығын алуға мүмкіндік береді. Демек, дозасы $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ болатын Au⁻ иондарымен сәулелендіру көпқабаттың шекараларында иондық «араласуға» әкелуі мүмкін. Екінші жағынан, наноөлшемді құрылымды қабаттары бар нанокомпозитті жабындар төсеніштердің жақсы механикалық қорғанысын қамтамасыз етеді. Әр түрлі құрылымы бар материалдардың екі немесе үш типті наноқабаттарынан пайда болған көпэлементті жабындар жоғары қаттылыққа ие болатындығын көрсеткен (30-70 ГПа). Олар эпитаксиалды құрылым құра алады немесе тіпті өздерінің құрылымы мен модуляция кезеңіне байланысты асқын қаттылық эффектісін көрсете алады.

Өз матрицаларында алтын, мырыш немесе күмістің нанобөлшектері бар материалдар күшті антибактериалды әсерлерге ие және биологиялық импланттар мен протездердің қорғаныс қабаттары ретінде өте жақсы кандидат ете алатын биоүйлесімділігіне ие. Заманауи биотехникалық әдістермен бірге жүретін озық наноматериалдардың интеграциясы арқасында антибактериалды материалдар саласындағы соңғы жаңалықтар қатары арта түсуде.

Сонымен қатар, әдебиет көздеріне талдау көрсеткендей, CrN негізіндегі көпқабатты жүйелердегі ыдырау сипатына қарай фазааралық шекаралар мен торлардың сәйкес келмеуінің әсері әлі де жеткілікті дәрежеде зерттелмегені анықталды. Бұл мәселені нақтылау үшін осы диссертациялық жұмыста маңызды физикалық және механикалық қасиеттердің өзгеруін түсіну үшін ауыр Au⁻ иондарымен қарқынды импланттау сияқты экстремалды жағдайларда фазалық тұрақтылық арасындағы әсерлесуі зерттеледі. Сонымен бірге, тұндырылған көпқабатты жабындардың араласу термодинамикасын сипаттау үшін молекулалық динамика әдісі аясында $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x\text{SiN}$ қатты ерітіндісі мен $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x\text{SiN/CrN}$ гетероқұрылымын салыстыру тәсілімен зерттеледі.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты наноқабатты құрылымы бар нанокомпозитті (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындардың фазалы-құрылымдық күйіне және физика-механикалық қасиеттеріне Au⁻ иондарымен импланттаудың әсерін зерттеу болып табылады.

Осы қойылған мақсатқа қол жеткізу жету үшін келесі **негізгі міндеттер** қойылды:

- Наноқабатты құрылымы бар нанокомпозитті (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындарды болат төсеніште бу фазасынан вакуумды-доғалы бүрку әдісі арқылы алу және кейін оларды Au⁻ иондарымен импланттау;

- Наноөлшемді қабаттары бар (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындардың құрылымын, фазалық және элементтік құрамын XRD, SIMS, RBS, микроталдауы бар HR TEM көмегімен зерттеулер жүргізу. Көпқабатты жабындағы Au⁻ иондарының тасымалдануын бағалау;

- Нанокөмпозитті (TiAlSiY)N/CrN жабындарының механикалық, трибологиялық және антибактериалды сипаттамаларына иондық импланттаудың әсерін зерттеу;

- Молекулалық динамика әдісі негізінде араластыру термодинамикасын бағалау үшін тұндырылған жабындардың құрылысын үлгілейтін $Ti_{1-x}Al_xN/CrN$ (111) гетерокұрылымдарына есептеулер жүргізу.

Зерттеу нысаны - наноқабатты құрылымы бар нанокөмпозитті (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындар, дозасы $1 \cdot 10^{17}$ см⁻² Au⁻ иондарымен импланттау процесі, импланттауға дейінгі және кейінгі нанокөмпозитті жабындардың қасиеттері, сондай-ақ молекулалық динамика әдісімен алынған есептеулердің нәтижелері.

Зерттеу мәні - импланттауға дейінгі және кейінгі (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындардың беткі қабатының микроқұрылымының және трибомеханикалық қасиеттерінің өзгеруі. Молекулалық динамика әдісі көмегімен $Ti_{1-x}Al_xN$ қатты ерітіндісіне және $Ti_{1-x}Al_xN/CrN$ (111) гетерокұрылымына арналған араластыру энергиясын, құрамына байланысты $Ti_{1-x}Al_xN$ қорытпаларының тор параметрлері мен гетерокұрылымның түзілу энергияларын анықтау. Жабындардың адгезиялық/когезиялық беріктілігін және үйкеліс пен кесу кезіндегі бұзылу механизмін анықтау, сонымен қатар вакуумды-доғалы әдіспен тұндырылған жабындардың наноқаттылығы мен серпімділік модулін өлшеу және осы сипаттамалардың иондық импланттау әсерінен өзгеруін анықтау.

Зерттеу әдістері. Осы диссертациялық жұмысты орындау барысында келесі эксперименттік әдістер қолданылды: фазалық құрамын, микроқұрылымы мен тор параметрлерін рентгенқұрылымдық талдаумен (XRD) және таңдалып алынған бөліктерді дифракциясы мен микроталдауы бар жоғары дәлдіктегі жарықтандырғыш электронды микроскопиямен (HRTEM) анықтау; элементтік құрамын энергия-дисперсиялық спектроскопиямен (EDS), екінші иондық масс-спектроскопиямен (SIMS) және резерфордтық кері шашырау спектроскопиясымен; жабындағы химиялық байланыстарды рентгендік фотоэлектронды спектроскопиямен (XPS); жабынның бетін және беттік қабаттарын атомдық-күштік микроскопиямен (АКМ); наноқаттылық пен серпімділік модулін өлшеулер наноинденторда жүргізілді; кристаллитерінің басым (111) бағдарымен $B_1Ti_{1-x}Al_xN/B_1-CrN$ көпқабатты жабындарын компьютерлік үлгілеу псевдопотенциал әдісі көмегімен есептеулері арқылы жүргізілді.

Жұмыстың ғылыми жаңашылдығы:

Алғашқы рет көпқабатты қорғаныс жабындары өңделген тұндыру әдісімен алынған (TiAlSiY)N және CrN наноөлшемді қабаттардан жасалған нанокөмпозитті жабындардың фазалы-құрылымдық күйіне Au⁻ иондарымен импланттаудың әсері зерттелді;

Алғашқы рет HR TEM және XRD эксперименттік әдістерімен алынған гетерокұрылымның фазалық құрамы көрсетілді. Бөліну шекараларының жоғары түзілу энергиясы әсерінен (111) бағаналы құрылымы мен өлшемі шамамен 10 нм нанодәндері бар $Ti_{1-x}Al_xN/CrN$ екі қабаттарының когерентті өсуі анықталды.

Наноиндентирлеу нәтижелері сәулеленудің жеткілікті жоғары дозасына карамастан жабынның жоғары «қорғаныс» қабілеттерін көрсетілді.

Наноқабатты құрылымы бар нанокомпозитті (TiAlSiY)N/CrN негізіндегі жабындарының қорғаныс қабаттарының жоғары трибологиялық қасиеттеріне ие екендігі көрсетілді.

Қорғауға шығарылатын негізгі қағидалар:

1 Көпқабатты қорғаныс жабындарын вакуумды-доғалы разряд арқылы тұндыру бойынша өңделген әдіспен алынған (TiAlSiY)N/CrN тұратын наноөлшемді қабаттар негізіндегі жабындардың құрылымды-фазалық күйіне Au⁻ иондарының әсер ету заңдылықтары;

2 Au⁻ иондарымен импланттаудың нәтижесінде (TiAlSiY)N/CrN жабындарының қорғаныс қабілеттері жақсарған трибомеханикалық қасиеттерінің және бактериялар белсенділігі төмендеген антибактериалдық қасиеттерінің өзгерісі;

3 Тұндырылған жабындарды үлгілеуші Ti_{1-x}Al_xN/CrN (111) гетероқұрылымдарын молекулалық динамика әдісі негізінде нанокомпозитті (TiAlSiY)N/CrN жабындарының араластыру термодинамикасының энергиясын есептеулер нәтижелері.

Жұмыстың ғылыми және практикалық маңыздылығы.

Алынған нәтижелер наноөлшемді қабаттардың бөліну шекараларындағы, сондай-ақ наноқабатты архитектуралы жабындардың ауыр Au⁻ иондарымен әсерлесуі кезіндегі процестерді түсіну үшін анағұрлым тереңірек түсініктерді қалыптастырады.

«Көпқабатты қорғаныс жабыны» пайдалы моделі алынды, ҚР ӘМ «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК, №5824, бюллетень 05 ақпан 2021 ж.

Диссертациялық жұмыстың зерттеу нәтижелерін оқу процесіне енгізу актілері және «Машзауыт» ЖШС болашақ жобаларында қолдану үшін экономикалық қаражатсыз өндіріске ендіру актісі алынды.

Диссертациялық жұмыс тақырыбының ғылыми-зерттеу жобаларымен байланысы. Диссертациялық жұмыс «Д. Серікбаев атындағы ШҚТУ» КЕАҚ, «С.Аманжолов атындағы ШҚУ» КЕАҚ (Өскемен қ., Қазақстан) және Сумы мемлекеттік университетінде (Сумы қ., Украина) гранттық қаржыландырудың келесі мемлекеттік бюджеттік жобаларын іске асыру аясында жүргізілді:

1) ҚР БжҒМ Ғылым комитетінің қаржыландыруымен «Машина жасау бұйымдарына арналған тозуға төзімді материалдар алудың инновациялық технологияларын зерттеу және әзірлеу» тақырыбы бойынша, мемлекеттік тіркеу №0118РК00989, Келісім шарт №197, 16.03.2018 ж.

2) ҚР БжҒМ Ғылым комитетінің қаржыландыруымен «Үйкеліс пен тозудан қорғауға арналған өзгермелі архитектурасы бар нанометрлі масштабтағы көпкомпонентті және көпэлементті жабындар» тақырыбы бойынша, мемлекеттік тіркеу № AP05130362, Келісім шарт №104, 05.04.2018 ж.

Автордың жеке үлесі. Автордың жеке үлесі диссертациялық зерттеу тақырыбына арналған әдебиеттік мерзімді басылымдарды, атап айтқанда, отқа төзімді металдарға негізделген көпкомпонентті нитридті жабындарды іздеу және

оларға талдау жасаудан тұрады. Ғылыми кеңесшілермен бірге зерттеудің мақсаттары мен міндеттерін анықтады, тұндыру әдістері мен нанокөмірді жабындарды зерттеудің әдістерін таңдады. Диссертация авторы үлгілерді дайындауда тікелей қатысты, алынған жабындардың фазалық құрамын, беттік морфологиясын зерттеп, тереңдігі және беті бойынша микроқаттылығы мен нанокаттылығын өлшеді, сонымен қатар нәтижелерді талдау мен мақалаларды жазуда кеңесшілермен және зертхана мамандарымен біріге отыра тікелей қатысты.

Жұмыста алынған нәтижелер мен жасалған қорытындылардың сенімділік деңгейі және түсіндірмесі. Міндеттерді қоюдың және жақсы тексерістерден өткен зерттеудің эксперименттік әдістерін таңдау мен қолданудың, мәліметтердің көлемі мен статистикасының бұрын алынған ТМД және алыс шетелдердің танымал ғалымдарының алған зерттеу нәтижелерімен салыстырудың нақтылығы мен айқындылығы.

Зерттеу нәтижелері көпшілік алдында жарияланды: ғылыми журналдарда жарық көрді, автор республикалық және халықаралық конференцияларда баяндады.

Диссертациялық жұмыстың апробациясы. Диссертациялық жұмыстың материалдары ғылыми конференцияларда баяндалды және талқыланды:

1. 7th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP 2017), (Одесса, Украина, 2017);

2. The International scientific-technical conference in honor of the 60th anniversary of the D. Serikbayev EKSTU, «The role of universities in creating an innovative economy» (Ust-Kamenogorsk, 2018);

3. «Уәлиев оқулары-2018»: «Қазіргі замандағы ғылым және білімнің дамуындағы тенденциялар» атты халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция, С.Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан мемлекеттік университеті (Өскемен, 2018);

4. «Жастар шығармашылығы – Қазақстанның инновациялық дамуына» атты студенттердің, магистранттардың және жас ғалымдардың VI Халықаралық ғылыми-техникалық конференциясы. Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан мемлекеттік техникалық университеті (Өскемен, 2020);

5. «Энергия және ресурстар үнемдеу технологиялары: тәжірибелер және келешегі» атты II Халықаралық ғылыми-тәжірибелік online конференция материалдары: Қорқыт Ата атындағы Қызылорда мемлекеттік университеті (Қызылорда 2020);

6. Advanced materials manufacturing and research: new technologies and techniques (AMM&R2021) international conference to be hosted virtually by D.Serikbayev East Kazakhstan technical university (Ust-Kamenogorsk, 2021).

Негізгі нәтижелер, Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан мемлекеттік университетінің базалық инженерлік дайындық факультетінің біріккен ғылыми семинарларында және Сумы мемлекеттік университетінің «Наноэлектроника» кафедрасының отырысында баяндалып, талқыланды, Украина, Сумы қаласы (мамыр, 2018 жыл).

Мақалалар. Диссертация тақырыбы бойынша барлығы 14 ғылыми мақала басылып жарияланды, оның ішінде 6 мақала ҚР БЖҒМ білім беру және ғылым саласындағы бақылау Комитеті бекіткен ғылыми басылымдарда, 2 мақала квинтильдері - Q1 және Q2 Web of Science Core Collection және Scopus халықаралық ақпараттық ресурстарына кіретін шетелдік ғылыми журналдарда, 6 мақала халықаралық конференция материалдарының жинақтарында, оның ішінде 1-і шетелдік халықаралық конференция материалдарының жинақтарында жарық көрді, 1 пайдалы моделге патент алынды.

Диссертациялық жұмыстың құрылымы мен көлемі. Диссертация кіріспеден, төрт тараудан, қорытынды мен пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады, барлығы 125 бет, 49 сурет, 6 кесте, 202 қолданылған әдебиеттер тізімі, 3 қосымша.