

ДИССЕРТАЦИЯҒА АННОТАЦИЯ

8D05301 – Техникалық физика мамандығы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін ұсынылған **«Көпкомпонентті нитридті жабындардың микроструктурасы мен трибомеханикалық қасиеттерін зерттеу»** тақырыбындағы диссертация, орындаушы:
АЛЕКСЕЙ ВАЛЕРЬЕВИЧ КАСЫМБАЕВ

Диссертациялық жұмыс конденсирленген күй физикасы, беттік физика және плазма физикасы саласындағы кешенді эксперименттік зерттеу болып табылады. Жұмыс «Техникалық физика» мамандығы аясында орындалып, перспективалық наноматериалдар класы – көпкомпонентті, көпқабатты және градиентті нитридті жабындардың (ион-плазмалық тұндыру әдістері: катодты-доғалық булану, реактивті магнетронды бүрку арқылы синтезделген) құрылымы мен функционалдық қасиеттерін қалыптастырудың физикалық заңдылықтары мен механизмдерін анықтауға арналған. Негізгі назар «вакуумдық тұндыру параметрлері – өсу кинетикасы – құрылым – қасиеттер» өзара байланыстарын зерттеуге бөлінген.

Диссертация тақырыбының өзектілігі. Жұмыстың өзектілігі беттік физика саласындағы іргелі мәселелермен, атап айтқанда теңгерімсіз жағдайларда синтез кезінде қатты денелердің нанодөңгейдегі құрылымы мен қасиеттерін басқару мәселелерімен байланысты. Өзгеріп отыратын энергиямен интенсивті ион ағындарының әсерінен күрделі көпкомпонентті жүйелерде (WN/MeN, TiAl(Si)N) фазалық түзілу, кернеудің релаксациясы, интерфейстер мен текстураның қалыптасуын анықтайтын физикалық механизмдер туралы білімнің жетіспеушілігі бар. Бұл мәселелерді шешу экстремалды жағдайларда жұмыс істейтін шекті сипаттамалары бар материалдарды алудың жаңа плазмалық технологияларының ғылыми негізін құру үшін қажет, бұл физика-техникалық ғылымдарды дамытудың басым бағыттарына және импортты ауыстыру мәселелеріне сәйкес келеді.

Зерттеудің мақсаты. Вакуумдық физикалық тұндыру параметрлерінің (иондар энергиясы, реактивті газдың қысымы, тұндыру геометриясы, табанның ығысу кернеуі) көпқабатты WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) жүйелеріндегі және градиентті TiAl(Si)N жабындардағы өсу кинетикасына, құрылымдық-фазалық түрленулерге, ішкі кернеулердің қалыптасуына және функционалдық (механикалық, трибологиялық) қасиеттер кешеніне әсер ететін іргелі физикалық заңдылықтарды анықтау және зерттеу.

Зерттеудің міндеттері. 1. Катодтық доғалық физикалық буландыру (CA-PVD) әдісімен көпқабатты WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) жабындарын және магнетрондық бүрку әдісімен градиентті TiAl(Si)N жабындарын синтездеу;

2. Осажденген көпқабатты WN/MeN және градиентті TiAl(Si)N жабындарының фазалық құрамын, құрылымын, механикалық және трибологиялық қасиеттерін зерттеу;

3. Өткізгіш және сканерлеуші электрондық микроскопия әдістерін пайдалана отырып, пленкалардың микроструктурасын талдау;

4. Әртүрлі көпқабатты жүйелердің микроструктурасы мен трибомеханикалық қасиеттері арасындағы байланысты анықтау;

5. Бөлме температурасында CA-PVD әдісімен алынған WN/NbN жабындарының қасиеттеріне теріс ығысу потенциалының әсерін зерттеу;

6. Градиентті TiAl(Si)N жүйесінің жабын қалыңдығының микроструктура мен трибомеханикалық қасиеттерге әсерін зерттеу.

Зерттеу нысаны. Катодты-доғалық булану (CA-PVD) әдісімен синтезделген көпқабатты наноқұрылымды WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) жабындар және реактивті магнетронды тұндыру әдісімен алынған градиентті TiAl(Si)N жабындар.

Зерттеу пәні. Жабындарды синтездеу және модификациялау кезіндегі физикалық құбылыстар мен процестер: плазманың теңгерімсіз жағдайындағы өсу кинетикасы, фазалық түзілу және полиморфты түрленулер, ішкі кернеулердің қалыптасуы,

релаксациясы және әсері, наноинденттеу және сырғанау үйкелісі кезіндегі деформациялық әрекет.

Зерттеу әдістері. Жабындарды тұндыру үшін таза металл нысандарымен жабдықталған жетілдірілген CA-PVD “Булат-6” жүйесі пайдаланылды. Фазалық талдау шағын бұрышты рентгендік дифракция (GIXRD) әдісімен жүргізілді. Морфология мен элементтік құрам сканерлеуші электрондық микроскопия (РЭМ) арқылы, толқын ұзындығы бойынша дисперсиялық (WDS) және энергия бойынша дисперсиялық (EDS) рентгендік спектроскопия қондырғыларын пайдалану арқылы зерттелді. Қосымша зерттеу әдістері ретінде Оже-спектроскопия, Раман спектроскопиясы және конфокальды лазерлік сканерлеуші микроскопия (КЛСМ) қолданылды. Фокустаушы иондық шоқ (ФИП) әдісімен дайындалған жабындардың жұқа тіліктері трансмиссиялық электрондық микроскопта (ТЭМ) зерттелді. Бірінші принциптерге негізделген есептеулер “Quantum ESPRESSO” бағдарламалық кодында жүргізілді. Жабындардың механикалық қасиеттері – наноқаттылық пен серпімділік модулі – наноинденторлық сынақтармен бағаланды. Адгезиялық беріктік арнайы бейімделген Роквелл инденторы арқылы скретч-тест көмегімен анықталды. Тозу және үйкеліс коэффициенті “Шар-диск” жүйесімен өлшенді.

Қорғауға ұсынылатын негізгі тұжырымдар

1. Катодтық доғалық физикалық буландыру (CA-PVD) әдісімен алынған көпқабатты WN/MeN (Me = Cr, Zr, Mo, Nb) жабындары зерттелді. WN/NbN жүйесінің тозу жылдамдығының коэффициенті (1.7×10^{-6}) WN/ZrN, WN/CrN және WN/MoN жүйелеріне қарағанда төмен екені анықталды және тиісінше шамамен 200, 6.5 және 5 есе артық нәтиже көрсетті;

2. Ығысу потенциалының -200 В дейін ұлғаюы β -W₂N, ϵ -NbN және δ -NbN фазаларының дән өлшемдерінің ұлғаюына және WN/NbN жабындарындағы қалдық кернеудің төмендеуіне әкелетіні анықталды;

3. Градиентті құрамдағы TiAl(Si)N жабындарының қалыңдығын 600 нм-ге дейін арттыру олардың микроструктурасына әсер етіп, жабынның қаттылығын 38 ГПа дейін арттыратыны анықталды.

Зерттеудің негізгі нәтижелері

1. WN/NbN көпқабатты жүйесінің артықшылығын анықтау және оның рекордтық тозуға төзімділігінің физикалық себептерін ашу.

CA-PVD әдісімен бірдей жағдайларда синтезделген төрт көпқабатты жүйе: WN/ZrN, WN/CrN, WN/MoN және WN/NbN салыстырмалы зерттелді.

WN/NbN жүйесінің ең жақсы кешенді қасиеттерге ие екендігі эксперименттік түрде дәлелденді: жоғары қаттылық (35,7 ГПа) төмен серпімділік модулі (383,9 ГПа) және максималды иілгіштік индексі $H/E = 0,093$ -пен үйлесімді.

WN/NbN жүйесінің рекордтық төмен меншікті тозу жылдамдығына – $1,7 \times 10^{-6}$ мм³/Н·м ие екендігі анықталды, бұл басқа зерттелген жүйелерге қарағанда бір реттік шамаға төмен (мысалы, WN/ZrN үшін $3,8 \times 10^{-4}$ мм³/Н·м).

Рентген-дифракциялық талдау (РДА) және трансмиссиялық электрондық микроскопия (ТЭМ) әдістері арқылы WN/NbN жүйесінің жоғары тозуға төзімділігі екі нанокристалдық фазадан – алтыбұрышты (ϵ -NbN) және кубтық (δ -NbN) тұратын NbN қабатының нанокөпозиттік құрылымымен түсіндіріледі. Алтыбұрышты фаза жоғары қаттылықты, ал кубтық фаза иілгіштікті қамтамасыз етеді, олардың үйлесімі синергетикалық әсер туғызады.

2. TiAl(Si)N градиентті қаптамаларының құрылымы мен қасиеттеріне олардың қалыңдығының әсерін жүйелі түрде зерттеу және тәуелділіктердің монотонды емес сипатын анықтау.

Қалыңдығы ~400 нм, ~600 нм және ~800 нм болатын үш TiAl(Si)N градиентті қаптама үлгісі синтезделді.

СЭМ және РДА әдістері арқылы құрылымның айқын эволюциясы анықталды: қалыңдық артқан сайын микроқұрылым ұсақ түйірді (микрожарықтармен) ірі бағанды (пирамидалы түйірлермен) құрылымға дейін өзгереді.

Наноинденттеу әдісі арқылы максималды қаттылық (~38 ГПа) және серпімділік модулі (~550 ГПа) 600 нм аралық қалыңдықта (2-үлгі-600) жететіні анықталды. Бұл қатты ерітіндімен бекіту мен нанокомпозиттік құрылымның түзілуі арасындағы оңтайлы тепе-теңдікпен түсіндіріледі.

Парадоксальды факт анықталды: ең төмен қалыңдығы (400 нм) бар үлгі, қаттылығы төмен болғанына қарамастан, ең жақсы трибологиялық сипаттамаларды көрсетті – ең төмен және тұрақты үйкеліс коэффициенті. Бұл оның серпімді деформация (H/E) және пластикалық деформацияға қарсылық (H^3/E^2) критерийлерінің жоғары мәндеріне байланысты, бұл оның жоғарылаған серпімділігі мен жүктеме энергиясын шашырата алу қабілетін көрсетеді.

3. Табандық ығысу кернеуінің (U_s) WN/NbN көпқабатты қаптамаларының құрылымдық эволюциясына және трибологиялық механизмдеріне әсері анықталды және егжей-тегжейлі зерттелді.

Табандық ығысу потенциалын -50 В-тан -200 В-қа дейін арттыру айтарлықтай құрылымдық өзгерістерге әкелетіні көрсетілді: екі қабатты қабат периодының (Λ) ~15 нм-ден ~10 нм-ге дейін азаюы, қабаттар аралық араласудың күшеюі және градиентті текстураның қалыптасуы.

GIXRD әдісі арқылы қаптама қалыңдығы өскен сайын, әсіресе табандық ығысу потенциалы жоғары кезде, кристаллографиялық текстураның аралас (200)+(111) текстурадан айқын (111) текстураға эволюциясы алғаш рет бекітілді. Бұл өсу процесінде жүйенің жалпы энергиясының (беттік және деформациялық) минимизациялануымен түсіндіріледі.

Табандық ығысу потенциалы өскен сайын, беткі қабаттағы ϵ -NbN хрупті алтыбұрышты фазасының үлесі азаятыны анықталды, бұл қасиеттерге оң әсер етеді.

Алынған нәтижелердің ғылыми жаңашылдығы

1. WN/NbN көпқабатты жүйесіндегі NbN қабатының нанокомпозиттік құрылымы мен ерекше жоғары иілгіштік индексі негізінде болатын, беріктілік пен тозуға төзімділіктің синергетикалық артуының физикалық механизмі алғаш рет анықталып сипатталды.

2. TiAl(Si)N градиентті қаптамаларында қаттылық пен серпімді қасиеттер арасындағы оңтайлы тепе-теңдікке қаптама қалыңдығының әсер ету заңдылығы, оның өсу кинетикасымен байланыстырылып, алғаш рет анықталды.

3. Кернеу ығысуы мен қалыңдыққа байланысты WN/NbN көпқабатты қаптамаларының кристаллографиялық текстурасының эволюциясы, олардың тозу механизмдеріне шешуші әсер ететіні, алғаш рет анықталып жан-жақты зерттелді.

4. Вакуумдық катодты-доғалық тұндыру әдісімен трибологиялық қолдану үшін перспективалы материалдар класын кеңейтетін WN/MoN көпқабатты қаптамалары алғаш рет алынып сипатталды.

Практикалық маңыздылығы. Жұмыс нәтижелері ионды-плазмалық технологиялардың физика-техникалық негіздерін дамыту үшін практикалық маңызға ие. Алынған деректер берілген қасиеттері бар қаптамаларды жасау үшін синтез процестерін бағдарлана басқаруға мүмкіндік береді.

Зерттеу нәтижелерінің маңыздылығы әртүрлі техникалық салаларда қолдану үшін жақсартылған сипаттамалары бар жаңа қорғаныш қаптамаларды әзірлеу мүмкіндігінде жатыр, мысалы:

Тозуға төзімділікке және жоғары температураға төзімділікке жоғары талаптар қойылатын құрал-жабдықтар мен механизмдерді өндіру, мысалы, кескіш және абразивтік құралдар, әсіресе жоғары температура мен агрессивті орта жағдайында.

Авиация және автомобиль өнеркәсібіндегі компоненттер үшін абразивтік тозу, коррозия және жоғары температурадан жоғары дәрежедегі қорғаныс қажет болатын қорғаныш қаптамаларын жасау.

Энергетика саласында жоғары температура мен агрессивті орта жағдайында жұмыс істейтін жабдық компоненттерін абразивтік және коррозиялық тозудан қорғау үшін қолдану, мысалы, атом реакторларында.

Медициналық өнеркәсіпте хирургиялық аспаптар және имплантаттар сияқты тозуға төзімділігі жоғары құралдар мен құрылғыларды жасау үшін пайдалану.

Алынған нәтижелердің сенімділігі және негізділігі. Нәтижелердің сенімділігі мыналармен қамтамасыз етілген:

Өзара толықтыратын физикалық зерттеу әдістері кешенін қолдану (Рентгендік дифракциялық талдау - РДА, Растрлық электронды микроскопия - РЭМ, Трансмиссиялық электронды микроскопия - ТЭМ, наноинденттеу, трибологиялық сынақтар). Үлгілер сериялары бойынша нәтижелердің қайталанатындығы және олардың статистикалық өңделуі. Тәуелсіз эксперименттерден және әртүрлі әдістермен (мысалы, РДА және ТЭМ) алынған деректердің сәйкестігі.

Ғылыми даму бағыттарына немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкестігі

Осы диссертациялық жұмыстың эксперименттік нәтижелері Қазақстан Республикасының Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті мемлекеттік мекемесінің қаржылық қолдауымен 2024 жылғы 20 маусымдағы №128ЖГ 5 келісімшартының аясында «Жаңа жоғары қаттылыққа, коррозияға және тозуға төзімді көпқабатты TiAlN/Si жабындары» тақырыбы бойынша (№AP22684071), сондай-ақ мақсатты қаржыландыру бағдарламасы «Шығыс Қазақстан облысының тау-кен металлургия саласының тұрақты дамуын қамтамасыз етуге арналған бәсекеге қабілетті, ғылыми негізделген технологияларды әзірлеу және енгізу» (№BR24992854) жобасы аясында алынды.

Жұмыста алынған нәтижелердің ғылыми негізділігі мен сенімділігі теориялық және эксперименттік зерттеулердің дұрыстығы мен жүйелілігі арқылы қамтамасыз етілді. Бұл зерттеулерге жабындардың химиялық және фазалық құрамын терең талдау бойынша тәжірибелер, тиімді талдау әдістерін қолдану және халықаралық стандарттарды сақтау кіреді.

Диссертациялық жұмыстың негізгі нәтижелері Қазақстан Республикасының Ғылым және жоғары білім министрлігінің ғылым мен жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған ғылыми басылымдарда, сондай-ақ Scopus және Web of Science деректер базаларына енгізілген шетелдік рецензияланатын ғылыми журналда жарияланды.

Докторанттың әрбір жарияланымды дайындауға қосқан жеке үлесі

Kassymbaev A., Myakinin A., Uazyrkhanova G. et al. Influence of Thickness on the Structure and Properties of TiAl(Si)N Gradient Coatings // Coatings. 2025.

Докторанттың үлесі: қаптамаларды синтездеу бойынша тәжірибе жүргізуге тікелей қатысу, механикалық және трибологиялық қасиеттерді өлшеу, деректерді талдау және түсіндіру, мәтін мен нәтижелерді визуалдануды дайындауға үлес қосу.

Smyrnova K., Sahul M., Harsáni M. et al. Microstructure, Mechanical and Tribological Properties of Advanced Layered WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) Nanocomposite Coatings // Nanomaterials. 2022.

Докторанттың үлесі: тәжірибелерді жоспарлауға қатысу, трибологиялық сынақтар жүргізу және деректерді талдау, сондай-ақ төменбұрышты рентгендік дифракция спектрлерін алу және үйкеліс пен тозу физикасы тұрғысынан нәтижелерді түсіндіру, мақала мәтінін жазуға және өңдеуге үлес қосу.

Smyrnova K., Sahul M., Harsáni M. et al. Composite Materials with Nanoscale Multilayer Architecture Based on Cathodic-Arc Evaporated WN/NbN Coatings // ACS Omega. 2024.

Докторанттың үлесі: төменбұрышты рентгендік дифракция спектрлерін алуға қатысу, нәтижелерді талқылау және талдау, ығысу кернеуінің қаптама қасиеттеріне әсері туралы деректерді түсіндіруге үлес қосу, графикалық материалдарды дайындау және мәтінді өңдеу.

Kasymbayev A., Plotnikov S., Turlybekuly A., Pogrebnyak A. Исследование структурных свойств многокомпонентных, многослойных, твердых нанокompозитных покрытий // Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences. 2024. №1(13).

Докторанттың үлесі: қаптамаларды синтездеу және ионды имплантациялау бойынша тәжірибелік жұмысты жүргізу, Рентгендік дифракциялық талдау (РДА) және механикалық сынақтардың деректерін талдауға қатысу, нәтижелерді талқылау, қолжазба мәтінін дайындау.

Kasymbayev A., Smirnova K., Pogrebnyak A. Физические закономерности получения WN/ZrN композитных покрытий методом вакуумного дугового осаждения // Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences. 2024. №2(14).

Докторанттың үлесі: тәжірибелерді жоспарлауға қатысу, трибологиялық сынақтар жүргізу және деректерді талдау, нәтижелерді түсіндіру, мақала мәтінін жазу және өңдеу.

Жарияланымдар

1. Smyrnova K., Sahul M., Haršani M., Pogrebnyak A., Ivashchenko V., Beresnev V., Stolbovoy V., Čaplovič L., Čaplovičová M., Vančo L., Kusý M., Kassymbayev A., Satrapinsky L., Flock D. Microstructure, Mechanical and Tribological Properties of Advanced Layered WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) Nanocomposite Coatings // Nanomaterials. – 2022. – Vol. 12, Iss. 3. – P. 395. Q2 (Physics, applied), IF: 4.4. DOI: 10.3390/nano12030395

2. Smyrnova K., Sahul M., Harsáni M., Beresnev V., Truchly M., Čaplovic L., Čaplovicová M., Kusy M., Kozak A., Flock D., Kassymbayev A., Pogrebnyak A. Composite Materials with Nanoscale Multilayer Architecture Based on Cathodic-Arc Evaporated WN/NbN Coatings // ACS Omega. – 2024. – Vol. 9. – P. 17247-17265. Q2 (Multidisciplinary Chemistry), IF: 3.7. DOI: 10.1021/acsomega.3c10242

3. Kassymbayev A., Myakinin A., Uazyrkhanova G., Belisarova F., Sagidugumar A., Kimossov R. Influence of Thickness on the Structure and Properties of TiAl(Si)N Gradient Coatings // Coatings. – 2025. – Vol. 15, Iss. 6. – P. 710. Q2 (Materials Science, Coatings & Films), IF: 2.8. DOI: 10.3390/coatings15060710

4. Касымбаев А., Плотников С., Тұрлыбекұлы А., Погребняк А. Исследование структурных свойств многокомпонентных, многослойных, твердых нанокompозитных покрытий // Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences. – 2024. – №1(13). – С. 312-319. DOI: 10.53360/2788-7995-2024-1(13)-38. (Журнал Комитет тізіміне енгізілген).

5. Касымбаев А., Смирнова К., Погребняк А. Физические закономерности получения WN/ZrN композитных покрытий методом вакуумного дугового осаждения // Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences. – 2024. – №2(14). – С. 462-469. DOI: 10.53360/2788-7995-2024-2(14)-56. (Журнал Комитет тізіміне енгізілген).

Жұмыстың апробациясы

Диссертациялық зерттеудің негізгі нәтижелері төмендегі ғылыми іс-шараларда ұсынылып, талқыланды:

XVI Халықаралық ғылыми конференция «Қатты дене физикасы».

2025 жылдың 3-4 сәуірі, Өскемен, Қазақстан.