

УДК 538.915:539.612:544.14

DOI: 10.17223/00213411/64/4/24

А.В. БАКУЛИН, С.С. КУЛЬКОВ, С.Е. КУЛЬКОВА

**ВЛИЯНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ОКСИДНЫХ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СЛОЕВ
НА АДГЕЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА Ti_3Al/Al_2O_3 ***

Методом проекционных присоединенных волн в рамках теории функционала электронной плотности проведено систематическое изучение атомной и электронной структуры границы раздела $\alpha_2-Ti_3Al/\alpha-Al_2O_3(0001)$ с промежуточными металлическими (Nb, Mo, Ni, Re) и оксидными (Nb_2O_5 , MoO_3) слоями. Рассчитана работа отрыва на интерфейсах в зависимости от плоскости разрыва. Показано, что высокие значения энергии адгезии, полученные на интерфейсе с О-окончанием оксида алюминия, уменьшаются на границе раздела α_2-Ti_3Al/Me , но остаются большими на интерфейсе $Me/\alpha-Al_2O_3(0001)_O$ вследствие ионного вклада в механизм химической связи. Обсуждается также влияние оксидных слоев примесей на адгезионные свойства границ раздела сплав – оксид. Полученные результаты указывают, что разрушение будет происходить в оксиде примеси.

Ключевые слова: граница раздела, адгезия, химическая связь, электронная структура, теория функционала электронной плотности.

Введение

Алюминиды титана обладают комбинацией хороших механических свойств, которые делают их перспективными материалами для высокотемпературных применений в авиационной и космической промышленности [1, 2]. Однако недостаточная коррозионная стойкость Ti–Al-сплавов при высоких температурах с увеличением содержания титана ограничивает их использование [3]. Несмотря на то, что экспериментальные и теоретические исследования интерметаллических сплавов на основе титана и алюминия ведутся на протяжении многих десятилетий, например, [1, 2] и ссылки в них, они остаются в центре внимания. Экспериментальные исследования показали, что низкая коррозионная стойкость Ti–Al-сплавов с меньшим содержанием алюминия связана с ростом смешанных оксидных слоев, содержащих оксиды титана и алюминия, которые отслаиваются с увеличением толщины оксидной шкалы. Хотя начальные стадии окисления алюминидов титана отличаются в зависимости от содержания алюминия [4], на заключительных этапах одновременно происходит внутреннее и внешнее окисление [1, 4]. Внешняя оксидная пленка образована преимущественно TiO_2 со структурой рутила, тогда как на внутренней границе раздела сплав – оксид формируется пленка $\alpha-Al_2O_3$ со структурой корунда. Обоеднение сплава алюминием на внутренней границе раздела приводит к формированию интерфейса Ti_3Al/Al_2O_3 . Чтобы понять микроскопическую природу химических связей на границе раздела сплав – оксид, необходимо знать электронную структуру формирующихся интерфейсов, в том числе с промежуточными слоями.

Известно, что наибольшая адгезия была получена для интерфейсов Me/Al_2O_3 с ОЦК-металлами. При этом большое число работ посвящено изучению границы раздела $Nb(111)/Al_2O_3(0001)$, на которой значения энергии адгезии достигают $\sim 9.8\text{--}10.6$ Дж/м² [5–9]. В меньшей степени изучены теоретическими методами в рамках теории функционала электронной плотности интерфейсы между сплавами и оксидами. Отметим, что граница раздела $TiAl(111)/Al_2O_3(0001)$ впервые рассматривалась в работе [10]. Авторы определили наиболее предпочтительные интерфейсные структуры и оценили значения энергии адгезии, используя универсальное уравнение для энергии связи (UBER), предложенное в [11]. Ключевым фактором для предсказания энергии адгезии, по мнению авторов [10], является способность металлов отдавать заряд оксиду, т.е. формировать ионные связи. Кроме того, авторы данной работы считают, что O–Al-взаимодействие отвечает за адгезионную прочность данного интерфейса. Эта же граница раздела рассматривалась в работе [12]. Было показано, что ГЦК-конфигурация пленки сплава на кислородном окончании оксида является стабильной, как и в случае интерфейса $Al/Al_2O_3(0001)$ [13], что обусловлено значительной ионной составляющей в механизме связи и наименьшим интерфейсным расстоянием. Появление титана на

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2019-0031. Численные расчеты проводились на суперкомпьютере «СКИФ Cyberia» в Томском государственном университете.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>