

## Научные основы конструирования многослойных покрытий

Ивашенко С.А.

Белорусский национальный технический университет

Для формирования многослойных покрытий с прогнозируемыми физико-механическими и эксплуатационными свойствами необходимо знать величину энергии взаимодействия частиц покрытия с поверхностью основы и друг с другом.

В основу физической модели взаимодействия частиц были положены следующие принципы:

- взаимодействие частиц определяется бинарным взаимодействием ближайших трех координационных слоев;
- вероятность распределения валентных электронов по энергиям определяется уширением основного состояния и уширением всех возбужденных состояний нейтральных атомов, которые формируют кристаллическую структуру;
- в бинарном взаимодействии ковалентная связь определяется обменом электронов первой, второй и третьей кратности ионизации;
- доля ионной связи определяется из электроотрицательности взаимодействующих частиц или через дипольный электрический момент.

В соответствии с указанными принципами получена зависимость для расчета величины энергии взаимодействия частиц при ковалентной связи:

$$E_{\alpha} = Z^* \int_{-\infty}^{\epsilon_1} \rho_1(\epsilon_1) d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\epsilon_2} \rho_2(\epsilon_2) \frac{H_{11} + H_{12}}{1+S} d\epsilon_2. \quad (1)$$

При ковалентной и ионной связи:

$$E_{\alpha} = \int_{-\infty}^{\epsilon_1} \rho_1(\epsilon_1) d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\epsilon_2} \rho_2(\epsilon_2) \frac{H_{11} + H_{12}}{1+S} d\epsilon_2 + \sigma_i \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 R_{12}} - k_B T, \quad (2)$$

При ковалентной и диполь-дипольной связи:

$$E_{\alpha} = \int_{-\infty}^{\epsilon_1} \rho_1(\epsilon_1) d\epsilon_1 \int_{-\infty}^{\epsilon_2} \rho_2(\epsilon_2) \frac{H_{11} + H_{12}}{1+S} d\epsilon_2 + \frac{p_i^2 \varphi(a_i, N_i)}{4\pi\epsilon_0 R_{12}^3} - k_B T, \quad (3)$$

Возможность расчета величины энергии взаимодействия частиц создаст предпосылки для проектирования многофункциональных покрытий с прогнозируемым сочетанием физико-механических и эксплуатационных свойств (прочность сцепления, твердость, величина и знак остаточных напряжений). Рассчитаны величины энергии связи для различных материалов при бинарном взаимодействии частиц, а также при взаимодействии частиц покрытия с поверхностью основы из железа и алюминия.