

Ю. І. Богомол¹, П. І. Лобода¹, С. Ю. Тесля¹, В. М. Надтока², І. О. Гусарова²,
В. С. Красва²

Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"¹
Державне підприємство "Конструкторське бюро "Південне" ім. М.К. Янгеля"²

АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ СУМІСНОСТІ ФАЗ БАГАТОШАРОВИХ ПОКРИТТІВ MoSi_2 - MeB_2 -(Ti, Mo)

У роботі проведено дослідження термомеханічної сумісності багатошарових градієнтних покриттів MoSi_2 - MeB_2 -(Mo, Ti) на підкладці Inconel 718 методом скінченних елементів. Проаналізовано розподіл напружень і деформацій під час охолодження від 1000 °C до 20 °C. Покриття з демпферним шаром із Mo забезпечують високу стабільність за високих температур, тоді як Ti як демпфер підвищує пластичну адаптацію, але формує високі залишкові напруження в шарах. Найнижчі рівні напружень (~100 МПа) та найвища термомеханічна стабільність за циклічних нагрівально-охолоджувальних навантажень спостерігаються в композиції MoSi_2 - ZrB_2 -10 SiC-Mo. Результати підкреслюють важливість оптимального підбору бар'єрних і демпферних шарів для мінімізації термічних напружень та забезпечення цілісності покриттів у високотемпературних умовах.

Ключові слова: градієнтне покриття; MoSi_2 ; бориди перехідних металів; термомеханічна сумісність; мет од скінченних елементів; Inconel 718; термостійкість; залишкові напруження

Iu. Bogomol, P. Loboda, S. Teslia, V. Nadтока, I. Husarova, V. Kraieva

ANALYSIS OF THERMOMECHANICAL COMPATIBILITY OF PHASES IN MULTILAYER MoSi_2 - MeB_2 -(Ti, Mo) COATINGS

This work presents a finite element study of the thermomechanical compatibility of multilayer gradient coatings MoSi_2 - MeB_2 -(Mo, Ti) on an Inconel 718 substrate. The stress and deformation fields in the coatings were analyzed during cooling from 1000 °C to 20 °C. Coatings with Mo as the buffer layer showed high stability at elevated temperatures, while Ti as a buffer improved plastic accommodation but increased residual stresses in some layers. Among the studied compositions, MoSi_2 - ZrB_2 -10 SiC-Mo demonstrated the lowest stress levels (~100 MPa) and the highest thermomechanical stability under cyclic thermal loading. The results highlight the importance of selecting appropriate barrier and buffer layers to minimize thermal stresses and ensure coating integrity in high-temperature applications.

Keywords: gradient coating; MoSi_2 ; transition metal borides; thermomechanical compatibility; finite element analysis; Inconel 718; high-temperature stability; residual stress

Постановка проблеми. Ефективність використання сучасних літальних апаратів на пряму залежить від надійності та довговічності роботи складових частин реактивних та турбореактивних двигунів [1]. Одним із важливих завдань під час розробки нових матеріалів для авіаційної техніки є забезпечення високого рівня захисту корпусів не охолоджуваних камер згорання. Підвищення жаростійкості та жароміцності даних елементів дозволяють збільшити ресурс роботи двигунів у 2-5 разів, забезпечити вищий ККД та вищі температури роботи. Серед відомих матеріалів для робочих частин двигунів літальних апаратів є використання нікелевих та кобальтових жаростійких сплавів [2]. Але внаслідок роботи за високих температур 1300-1700 °C відбувається інтенсивна втрата міцності матеріалів корпусів, окиснення, в окремих випадках спостерігається утворення термічних тріщин, повзучість та деформація. Одним з варіантів захисту не охолоджуваних камер двигунів є формування захисних покриттів. Високий рівень термічної стабільності та формування захисних шарів в умовах дії агресивного середовища збагаченого O_2 , H_2O , CO_2 , сірчаними й хлорними домішками показують силіциди перехідних металів. Силіцидні покриття мають високі захисні властивості внаслідок формування щільної плівки SiO_2 яка не руйнується під час термоциклів [3]. Також отримані шари не розкладається, не утворює крихкі або нестабільні фази навіть за 1400–1800 °C. Проте, силіцидні матеріали, внаслідок значної відмінності в коефіцієнтах термічного розширення (к.т.р.) не здатні успішно працювати в умовах знакозмінних циклів нагрівання та охолодження. Саме тому оптимізація технології отримання, та складу захисних покриттів на основі силіцидів перехідних металів є актуальним завданням.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Максимально допустима температура роботи деталей силових установок літальних апаратів визначає межу можливого питомого імпульсу тяги двигунів [4]. Лише невелика кількість матеріалів здатні стабільно функціонувати в окислювальному середовищі за таких температур - зокрема платина (до ~1700 °C) та іридій (до ~2300 °C) [5]. Проте їхня надзвичайно висока вартість робить застосування цих матеріалів не практичними.

© Ю. І. Богомол, П. І. Лобода, С. Ю. Тесля, В. М. Надтока, І. О. Гусарова,
В. С. Красва

Для малопотужних літальних систем конструкційні матеріали потребують використання захисних покриттів, що перешкоджають їхній хімічній взаємодії з компонентами атмосфери, паливом і продуктами згоряння. Робоча температура таких композицій здебільшого визначається типом та мікроструктурою самого покриття. Підвищення термічної стійкості покриття безпосередньо дозволяє збільшити робочу температуру деталей силового блоку, а отже і підвищити питомий імпульс двигуна [5, 6].

Для неохолоджуваних елементів силових установок найчастіше застосовують ніобієві сплави та вуглець-вуглецеві композити, що зберігають високу міцність близько 2000 °С. Найпоширенішим захисним рішенням для роботи в окисних середовищах є покриття на основі силіцидів, які утворюють на поверхні захисну само відновлювальну плівку оксиду. Теоретично верхня межа жаростійкості покриттів із MoSi_2 становить приблизно 1800 °С. Для підвищення їхньої ефективності до температур до 1950 °С шар вищого силіциду модифікують металами, що формують надтверді оксиди й сповільнюють випаровування SiO_2 , завдяки чому покращується довговічність і термічна стабільність покриття [7]. Однією з проблем формування силіцидних покриттів на поверхні металів є висока різниця к.т.р. Різниця к.т.р. між силіцидним шаром та підкладкою призводить до накопичення термічних напружень під час нагрівання/охолодження. За рахунок напружень існує ризик формування тріщин, пористості та відшарування, що значно знижує властивості. В літературі наведено аналіз процесів відшарування покриттів $\text{MoSi}_2\text{-Mo}$ [8] оскільки к.т.р. $\text{MoSi}_2 \approx 8.5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $a_{\text{Mo}} \approx 5.8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Одним зі способів нівелювати вплив к.т.р. є використання композитних чи багатошарових покриттів. В роботі [9] показано, що введення дрібнодисперсних фаз (наприклад, $(\text{Mo}, \text{Ti})\text{Si}_2$, або T_1/T_2 фаз у системі Mo-Si-B) змінює ефективний к.т.р. та підвищує опір до утворення тріщин. Одночасно деякі багатофазні композиції забезпечують «самозаліковування» окалини під час окиснення. Для нівелювання впливу к.т.р. між MoSi_2 - Mo в роботі [10] запропоновано формування проміжного шару Mo_5Si_3 , наявність якого ефективно пригнічує дефекти через невідповідність к.т.р. між шарами. Також варто зазначити, що формування проміжного шару відбувається реакційно, що для багатьох застосувань є не припустим явищем. Більш перспективним є формування багатошарових градієнтних покриттів, шари якого будуть виконувати різні функціональні завдання. Найвищі захисні властивості та термічну стабільність демонструє MoSi_2 , щоб уникнути його дифузії в матеріал основи, та забезпечити рівномірну зміну к.т.р. можливим варіантом є застосування бар'єрних шарів на основі боридів тугоплавких металів [11]. Бориди за рахунок відносно не високих к.т.р. будуть менше розширюватись та стискатись, що може призводити до руйнування покриття на границі з основою [12]. Тому необхідно передбачати проміжний металевий шар, зазвичай на основі тугоплавких металів, для формування проміжної зміни к.т.р.

Постановка завдань. Виходячи з вище викладеного в роботі поставлено мету – провести оцінку термомеханічної сумісності фаз градієнтного покриття на основі $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - \text{Me}$ методом скінченних елементів, з метою встановлення оптимального складу покриття та його термомеханічних показників.

Викладення основного матеріалу. Модельні дослідження процесів термомеханічної сумісності шарів градієнтних покриттів проводили з використанням програмного забезпечення Comsol Multiphysics на лінійній моделі (рис. 1). Перший шар – виконує роль демпфера для зниження різниці к.т.р. між матеріалом основи та керамічними шарами. Як дослідні матеріали обрано тугоплавкі метали (Mo , Ti). Проміжний шар (бар'єрний) – протидіє дифузії атомів кремнію в глибину матеріалу основи, як дослідні матеріали було обрано бориди перехідних металів (TiB_2 , $\text{ZrB}_2\text{-SiC}$, MoB_2 , TaB_2). Основний жаростійкий шар – побудований на основі MoSi_2 . Матеріалом основи для покриття обрано жароміцний сплав Inconel 718. Товщина демпферного шару – 30 мкм, бар'єрного – 50 мкм, захисного – 100 мкм. Дослідження проводились в умовах нагріву та охолодження від 1000 °С до 20 °С.

В основі розрахунку напружень лежать ряд припущень та розрахункових моделей. Першою граничною умовою моделювання є накладання стаціонарних умов за яких діє правило статичної рівноваги в матеріалі, а саме сума внутрішніх напружень та зовнішніх сил дорівнює нулю: є

$$\nabla \cdot \sigma + F_v = 0,$$

де $\nabla \cdot \sigma$ – тензор напружень, МПа;

F_v – зовнішні сили, що діють на одиницю об'єму, Н.

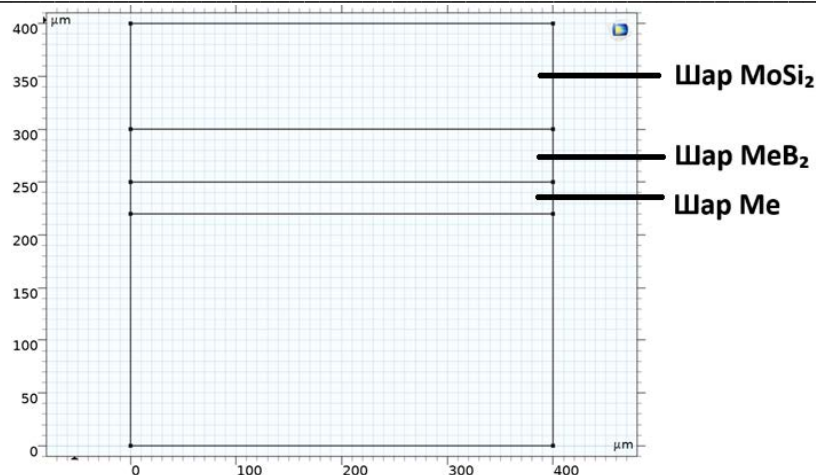


Рис. 1. Лінійна модель оцінки термомеханічної сумісності шарів покриття $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - \text{Me}$

Термічні напруження та деформація в шарах визначається відповідно до механічної моделі:

$$\sigma = (\sigma_0 + \sigma_{ext} + \sigma_q) + (C: \varepsilon_{el}), \varepsilon_{el} = \varepsilon - (\varepsilon_0 + \varepsilon_{ext} + \varepsilon_{th} + \varepsilon_{hs}), \varepsilon_{th} = \alpha(T)(T - T_{ref}),$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} [(\nabla u)^T + \nabla u], C = C(E, \nu),$$

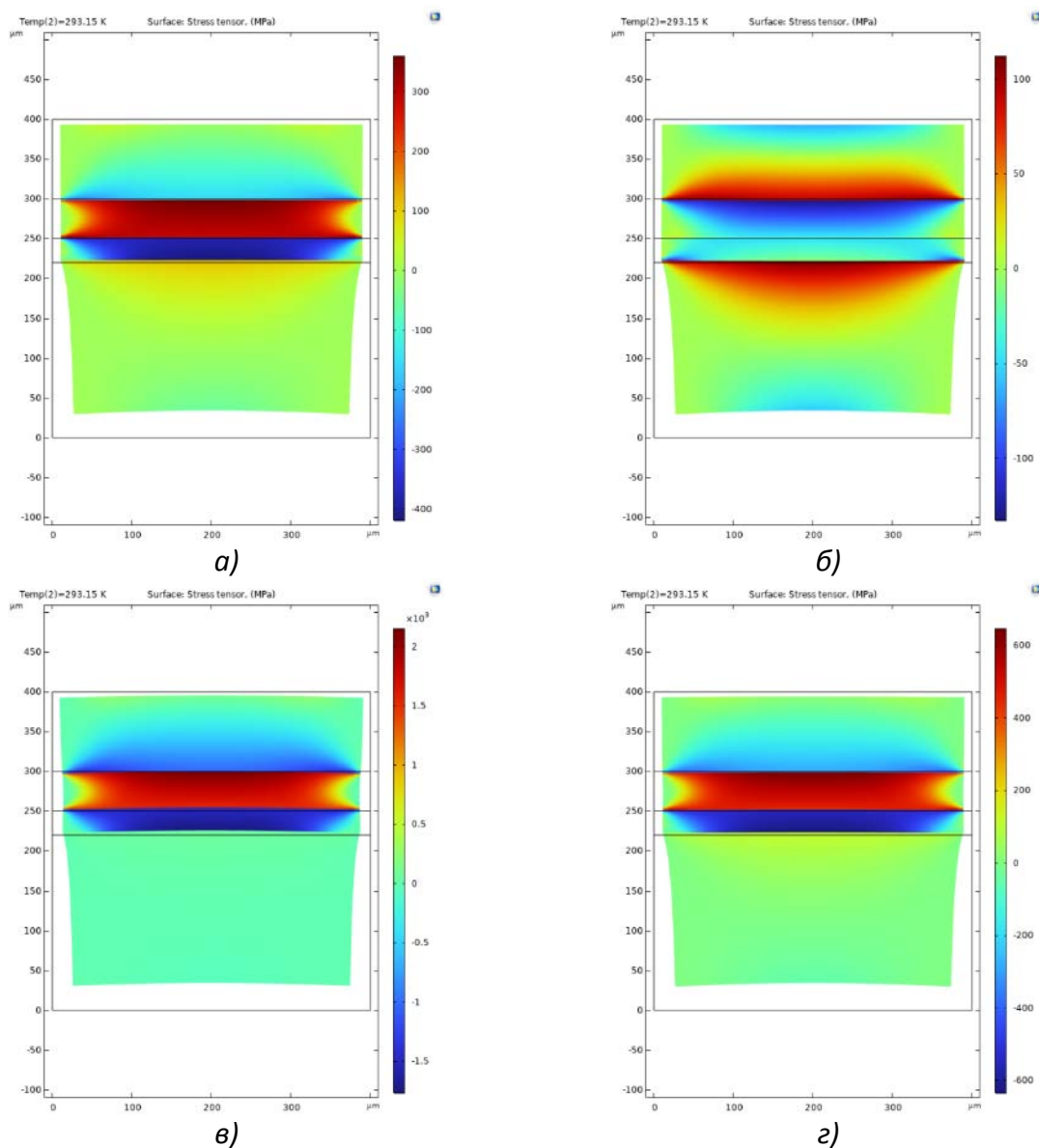
де σ_0 – початкові напруження в матеріалі, МПа; σ_{ext} – зовнішні (задані) напруження, МПа; σ_q – напруженні викликані нагріванням, МПа; C – функція жорсткості матеріалу; ε_{el} – пружна деформація; ε – повна деформація; ε_0 – початкова деформація; ε_{ext} – деформація під дією зовнішніх сил; ε_{th} – деформація між фазами; ∇u – градієнт переміщення; $(\nabla u)^T$ – транспонований градієнт переміщення.

На рисунку 2 наведено зміну поля напружень під час охолодження градієнтних покриттів $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - \text{Mo}$. Покриття $\text{MoSi}_2 - \text{TiB}_2 - \text{Mo}$ та $\text{MoSi}_2 - \text{ZrB}_2 - 10\text{SiC} - \text{Mo}$ демонструють найменші амплітудні коливання напружень в шарах серед обраних композицій (рис. 2, а, б). В системі з TiB_2 локалізація напружень фіксується в області бар'єрного та демпферного шарів. Граничні напруження не перевищують 300 МПа. В умовах помірного зниження температури, дане покриття може працювати зі збереженням цілісності та відсутності відшарування. Проте, за роботи в умовах циклічних режимів нагрівання/охолодження варто очікувати утворення термічних тріщин та деформацій. Високу термомеханічну стабільність натомість демонструє композиція з $\text{MoSi}_2 - \text{ZrB}_2 - 10\text{SiC} - \text{Mo}$. Вибір бар'єрного шару на основі дибориду цирконію з добавками карбїду кремнію, має на меті як технологічне, так і термомеханічне підґрунтя. Введення SiC , як відомо інтенсифікує процес спікання ZrB_2 та дозволяє отримати керамічні матеріали з відносною щільністю 90-95 % за температур спікання 1850 – 1900 °С. З іншої точки зору введення SiC дозволяє дещо знизити коефіцієнт термічного розширення наблизивши значення до металеві основи. В покриттях $\text{MoSi}_2 - \text{ZrB}_2 - 10\text{SiC} - \text{Mo}$ (рис. 1, б) спостерігається рівномірне поле напружень, величиною до 100 МПа, що вказує на високу працездатність композиції в умовах термоциклічних навантажень. Для композицій $\text{MoSi}_2 - \text{MoB}_2 - \text{Mo}$, $\text{MoSi}_2 - \text{TaB}_2 - \text{Mo}$ виникають напруження розтягу та стику вище 600 МПа. Вказане поле напружень не дозволяє успішно використовувати дані композиції для створення багатшарових градієнтних покриттів.

Молібден, як демпферний шар в градієнтних покриттях дозволяє забезпечити високу стабільність за високих температур експлуатації. Також він володіє високою міцністю та жорсткістю, що дозволяє уникати ефектів повзучості та деформації в приконтактних шарах покриття. Важливим недоліком молібдену є його низька окисна стійкість за високих температур, та високий модуль пружності, які за інших рівних умов може спричинити накопичення термічних напружень. Альтернативним варіантом демпферного шару покриття є титан. Титан є більш пластичним металом, відповідно варто очікувати кращу здатність до поглинання і розподілу пластичної деформації.

На відміну від молібдену, титан має кращу окисну стійкість за рахунок пасивації поверхні TiO_2 . На рисунку 3 наведено зміну поля напружень в шарах покриттів $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - \text{Ti}$. За рахунок

високої сумісності з TiB_2 як на атомно так і на мікрорівнях покриття покриттів $\text{MoSi}_2 - \text{TiB}_2 - \text{Ti}$ (рис. 3, а) в області демпфер – бар’єрний шар практично не демонструють накопичення напружень.



а) - TiB_2 , б) $\text{ZrB}_2\text{-}10\text{SiC}$, в) - MoB_2 , з) - TaB_2

Рис. 2. Зміна напружень по перерізу градієнтного покриття $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - \text{Mo}$

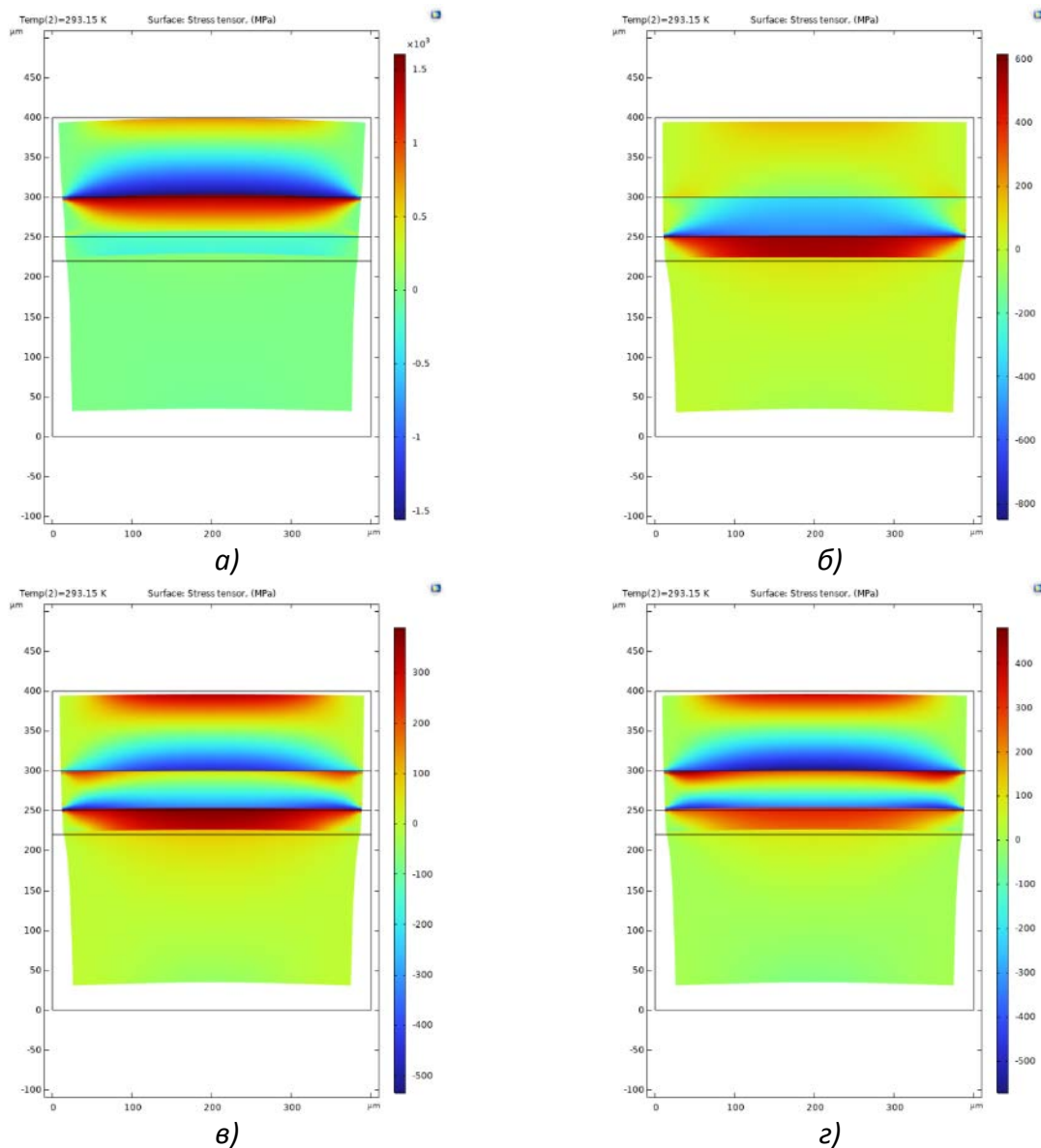
В той же час за рахунок високої відмінності в к.т.р $\text{MoSi}_2 - \text{TiB}_2$ досягаються критичні напруження близько 1400 МПа.

Порівняно з виростанням підшару Mo (рис. 2, б), шар Ti в композиції з $\text{MoSi}_2 - \text{ZrB}_2 - 10\text{SiC}$ (рис. 3, б) призводить до формування широкої області розтягу/стиску в демпферному та бар’єрному шарах. Рівень напружень досягається 550 МПа. Композиції $\text{MoSi}_2 - \text{MoB}_2 - \text{Ti}$, $\text{MoSi}_2 - \text{TaB}_2 - \text{Ti}$ (рис. 3, в, г) мають середнє значення напружень в шарах покриттів 300 МПа. Варто зазначити, що у випадку використання Ti складний напружено деформований стан формується у всіх шарах градієнтного покриття.

Висновки. В роботі проведено дослідження термомеханічної сумісності фаз багатшарових градієнтних покриттів $\text{MoSi}_2 - \text{MeB}_2 - (\text{Mo}, \text{Ti})$ на підкладці з Inconel 718 методом скінченних елементів. Відповідно до отриманих результатів, встановлено, що в процесі охолодження від 1000 °C до 20 °C відбувається формування складного напружено-деформованого стану в різних шарах покриттів. Найнижчі значення напружень на рівні 100 МПа досягаються в композиції $\text{MoSi}_2 - \text{ZrB}_2 - 10\text{SiC-Mo}$. Заміна демпферного шару на основі Mo на Ti показали, що практично для всіх

© Ю. І. Богомол, П. І. Лобода, С. Ю. Тесля, В. М. Надтока, І. О. Гусарова,
В. С. Краєва

дослідних композицій зберігається високий рівень залишкових напружень від 300 МПа до 1400 МПа, що не дозволяє забезпечувати стабільну роботу та цілісність покриттів в умовах циклічного нагрівання та охолодження.



a) - TiB₂, б) ZrB₂-10SiC, в)- MoB₂, з) - TaB₂

Рис. 3. Зміна напружень по перерізу градієнтного покриття MoSi₂ – MeB₂ – Ti

Порівняно з виростанням підшару Mo (рис. 2, б), шар Ti в композиції з MoSi₂ – ZrB₂ – 10SiC (рис. 3, б) призводить до формування широкої області розтягу/стиску в демпферному та бар'єрному шарах. Рівень напружень досягається 550 МПа. Композиції MoSi₂ – MoB₂ – Ti, MoSi₂ – TaB₂ – Ti (рис. 3, в, г) мають середнє значення напружень в шарах покриттів 300 МПа. Варто зазначити, що у випадку використання Ti складний напружено деформований стан формується у всіх шарах градієнтного покриття.

Висновки. В роботі проведено дослідження термомеханічної сумісності фаз багатшарових градієнтних покриттів MoSi₂ – MeB₂ –(Mo, Ti) на підкладці з Inconel 718 методом скінченних елементів. Відповідно до отриманих результатів, встановлено, що в процесі охолодження від 1000 °C до 20 °C відбувається формування складного напружено-деформованого стану в різних шарах покриттів. Найнижчі значення напружень на рівні 100 МПа досягаються в композиції MoSi₂ – ZrB₂ – 10SiC-Mo. Заміна демпферного шару на основі Mo на Ti показали, що практично для всіх дослідних композицій зберігається високий рівень залишкових напружень від 300 МПа до 1400

МПа, що не дозволяє забезпечувати стабільну роботу та цілісність покриттів в умовах циклічного нагрівання та охолодження.

Відомості про фінансування дослідження. Робота виконана за фінансової підтримки Національного фонду досліджень України (проект 2025.06/0079)

Література

1. Goswami, B., Sahay, S.K. and Ray, A.K.. "Application of Thermal Barrier Coatings on Combustion Chamber Liners – A Review." *High Temperature Materials and Processes*, vol. 23, no. 3, 2004, pp. 211-236. <https://doi.org/10.1515/HTMP.2004.23.3.211>
2. Smith R, Lewi G, Yates D (2001), "Development and application of nickel alloys in aerospace engineering". *Aircraft Engineering and Aerospace Technology: An International Journal*, Vol. 73 No. 2 pp. 138–147, doi: <https://doi.org/10.1108/00022660110694995>
3. Structure and Properties of High-Hardness Silicide Coatings on Cemented Carbides for High Temperature Applications / by Samuel Humphry-Baker 1 and Jessica Marshall // *Coatings*. – 2018. – Vol. 7, Is. 7. – p. 247, <https://doi.org/10.3390/coatings8070247>
4. Palocz-Andresen, M. (2013). *Airplane Engines*. In: *Decreasing Fuel Consumption and Exhaust Gas Emissions in Transportation*. Green Energy and Technology. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-11976-7_10
5. Alam, Z., Parlikar, C., Kumawat, M., Lakshmi, S. G., & Das, D. (2023). High Temperature Resistant Coatings for Strategic Aero space Applications. *Defence Science Journal*, 73(No 2), 171–181. <https://doi.org/10.14429/dsj.73.18638>
6. M. Shourgeshty, M. Aliofkhazraei, and M. M. Alipour, 'Introduction to High-Temperature Coatings', *High Temperature Corrosion*. InTech, Sept. 07, 2016. doi: 10.5772/64282.
7. Alam, M.Z., Rao, A.S. & Das, D.K. Microstructure and High Temperature Oxidation Performance of Silicide Coating on Nb-Based Alloy C-103. *Oxid Met* 73, 513–530 (2010). <https://doi.org/10.1007/s11085-010-9190-x>
8. T. Hsieh, H. Choe, E.J. Lavernia, J. Wolfenstine, The effect of Si₃N₄ on the thermal expansion behavior of MoSi₂, *Materials Letters*, Volume 30, Issues 5–6, 1997, Pages 407-410, ISSN 0167-577X, [https://doi.org/10.1016/S0167-577X\(96\)00226-1](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(96)00226-1).
9. Wei Li, Jinglian Fan, Yan Fan, Lairong Xiao, Huichao Cheng, MoSi₂/(Mo, Ti)Si₂ dual-phase composite coating for oxidation protection of molybdenum alloy, *Journal of Alloys and Compounds*, Volume 740, 2018, Pages 711-718, ISSN 0925-8388, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.08.173>.
10. Tao Fu, Yingyi Zhang, Luyu Chen, Fuqiang Shen, Junjie Zhu, Micromorphology evolution, growth mechanism, and oxidation behaviour of the silicon-rich MoSi₂ coating at 1200 °C in air, *Journal of Materials Research and Technology*, Volume 29, 2024, Pages 491-503, ISSN 2238-7854, <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.01.112>.
11. Ruixiong Zhai, Peng Song, Taihong Huang, Chao Li, Chen Hua, Wenlang Huang, Qing Li, Biju Zheng, Jiansheng Lu, Microstructure and oxidation behaviour of MoSi₂ coating combined MoB diffusion barrier layer on Mo substrate at 1300 °C, *Ceramics International*, Volume 47, Issue 7, Part A, 2021, Pages 10137-10146, ISSN 0272-8842, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.12.162>.
12. Yi Wang, Dezhi Wang, Jianhui Yan, Preparation and characterization of MoSi₂/MoB composite coating on Mo substrate, *Journal of Alloys and Compounds*, Volume 589, 2014, Pages 384-388, ISSN 0925-8388, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.12.023>.

Рецензент: Втерковський Михайло Ярославович, PhD, асистент КПП ім. Ігоря Сікорського, НН ІМЗ ім. Є. О. Патона, каф. ВТМ та ПМ