

Вінницький національний технічний університет
(повне найменування вищого навчального закладу)

Факультет інформаційних електронних систем
(повне найменування інституту, назва факультету (відділення))

Кафедра інформаційних радіоелектронних технологій і систем
(повна назва кафедри (предметної, циклової комісії))

МАГІСТЕРСЬКА КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на тему:

«МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТІ MOS2 КОМПОЗИТНОГО ПОКРИТТЯ»

Виконав: студент 2-го курсу, групи МНТ-23м
спеціальності 176 Мікро- та наносистемна
техніка

(шифр і назва напряму підготовки, спеціальності)

Оніщук М. О.
(прізвище та ініціали)

Керівник: д.т.н., проф., завідувач каф. ІРТС

Осадчук О. В.
(прізвище та ініціали)

«10» 12 2024 р.

Опонент: к.т.н., доц. доцент каф. ІКСТ

Семенова О. О.
(прізвище та ініціали)

«11» 12 2024 р.

Допущено до захисту

Завідувач кафедри ІРТС

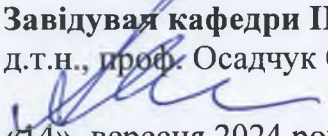
д.т.н., проф. Осалчук О.В.

(прізвище та ініціали)

«12» 12 2024 р.

Вінниця ВНТУ - 2024 рік

Вінницький національний технічний університет
Факультет Інформаційних електронних систем
Кафедра Інформаційних радіоелектронних технологій і систем
Рівень вищої освіти II-й (магістерський)
Галузь знань – 17 Електроніка, автоматизація та електронні комунікації
Спеціальність – 176 Мікро- та наносистемна техніка
Освітньо-професійна програма – Мікро- та наносистемна техніка

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри ІРТС
д.т.н., проф. Осадчук О.В.

«14» вересня 2024 року

ЗАВДАННЯ НА МАГІСТЕРСЬКУ КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ СТУДЕНТУ

Оніщуку Миколі Олександровичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Мікроструктури та властивості MoS₂ композитного покриття
керівник роботи д.т.н., проф., завідувач кафедри ІРТС Осадчук О.В.

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом вищого навчального закладу від «17» 09. 2024 р. № 310.

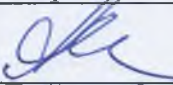
2. Строк подання студентом роботи 12.12.2024р.

3. Вихідні дані до роботи: домішка Ti (вміст 5/10/15 wt.%), вологість – 70%, температура навколишнього середовища 100 °С, нанотвердість повинна перевищувати 5 GPa при максимальній домішці 15 wt.%

4. Зміст текстової частини: Вступ. Теоретичні основи дослідження композитних покриттів на основі MoS₂. Експериментальне дослідження мікроструктури та властивостей композитного покриття на основі MoS₂. Симуляційне дослідження покриттів на основі MoS₂ із використанням домішок. Економічна частина. Висновки. Список використаних джерел. Додатки.

5. Перелік ілюстративного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень): Схематичне зображення фрикційно-переміщувального зварювання. Схематичне зображення нанесення шару MoS₂ шляхом електроіскрового легування. Пориста та стовпчаста структурою чистої плівки MoS₂. Приклад графічного інтерфейсу Virtual Coater V4.8.2. Схематичне зображення камери покриття. Мікрофотографії поверхні та поперечних перерізів композитних покриттів MoS -Ti з різним вмістом Ti. Рентгенограми композитних покриттів MoS₂-Ti. Результати випробувань композиційних покриттів MoS -Ti кулькою на диску з різним вмістом Ti у повітряному середовищі.

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	виконання прийняв
Основна частина	зав. каф. ІРТС, професор д.т.н. Осадчук О.В.		
Економічна частина	доцент каф. ЕПВМ, доцент, к.е.н., Кавецький В.В.		

7. Дата видачі завдання 16.09.2024 року

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів магістерської кваліфікаційної роботи	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Вибір, узгодження та затвердження тем МКР на випусковій кафедрі.	02.09.2024-07.09.2024	
2.	Огляд та аналіз літературних джерел.	08.09.2024-16.09.2024	
3.	Затвердження тем по ВНТУ. Розробка завдання на МКР.	17.09.2024-30.09.2024	
4.	Попередня розробка основних розділів. Аналіз вирішення поставленої задачі. Розробка структурної схеми та технічних рішень.	01.10.2024-20.10.2024	
5.	Математичне моделювання та електричні розрахунки. Експериментальне дослідження.	21.10.2024-04.11.2024	
6.	Розробка графічної частини МКР.	05.11.2024-15.11.2024	
7.	Економічна частина.	16.11.2024-25.11.2024	
8.	Оформлення пояснювальної записки та графічної частини.	26.11.2024-01.12.2024	
9.	Нормоконтроль.	02.12.2024-09.12.2024	
10.	Попередній захист МКР, доопрацювання, рецензування МКР.	10.12.2024-11.12.2024	
11.	Захист МКР ЕК.	13.12.2024	

Студент  Оніщук М. О.

Керівник роботи  Осадчук О.В.

АНОТАЦІЯ

УДК 620.22

Оніщук М. О. Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття
Магістерська кваліфікаційна робота. – Вінниця: ВНТУ, 2024 р. – 110 стор.,
28 рис., 65 бібл., 15 табл. – українською мовою.

Дана магістерська кваліфікаційна робота присвячена дослідженню мікроструктур і властивостей композитного покриття на основі дисульфиду молібдену (MoS_2). У роботі проаналізовано фізико-механічні та трибологічні характеристики покриттів, вивчено методи їх створення, включаючи магнетронне розпилення та інші сучасні технології. Проведено експериментальні дослідження з визначення впливу домішок на мікроструктуру та експлуатаційні властивості покриттів. Симуляційне моделювання дозволило оптимізувати склад композитного матеріалу для забезпечення стійкості до зношування, низького коефіцієнта тертя і довговічності в умовах мікро- та наносистемної техніки. Економічна частина роботи обґрунтовує доцільність впровадження отриманих рішень у промисловість.

Ключові слова: дисульфід молібдену, MoS_2 , композитні покриття, трибологічні властивості, магнетронне розпилення.

ABSTRACT

Onishchuk M. O. Microstructures and properties of MoS₂ composite coating – Vinnytsia: VNTU, 2024 – 110 pages, 28 figures, 65 bibl., 15 tables. - in the Ukrainian language.

This master's thesis is devoted to the study of microstructures and properties of composite coatings based on molybdenum disulfide (MoS₂). The work analyzes the physical, mechanical, and tribological characteristics of the coatings and examines methods for their creation, including magnetron sputtering and other advanced technologies. Experimental studies were conducted to determine the influence of additives on the microstructure and operational properties of the coatings. Simulation modeling optimized the composition of the composite material to ensure wear resistance, low friction coefficient, and durability under micro- and nanosystem technology conditions. The economic section of the work justifies the feasibility of implementing the obtained solutions in industry.

Keywords: molybdenum disulfide, MoS₂, composite coatings, tribological properties, magnetron sputter

ЗМІСТ

ВСТУП	8
1 ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПОЗИТНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ MoS_2	11
1.1 Властивості дисульфиду молібдену (MoS_2).....	11
1.1.1 Об'ємні властивості	12
1.1.2 Оптичні та електричні властивості.....	14
1.1.3 Механічні властивості.....	16
1.3 Фізико-механічні та трибологічні характеристики MoS_2 покриттів.....	27
1.4 Використання MoS_2 покриттів у мікро- та наносистемній техніці.....	30
1.5 Висновки до розділу 1	34
2 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНОГО ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ MoS_2	36
2.1 Методологія створення композитного покриття на основі MoS_2	36
2.2 Дослідження фізико-механічних властивостей покриття на основі MoS_2 ..	40
2.3 Вивчення трибологічних характеристик покриття на основі MoS_2	43
2.3.1 Вплив вмісту MoS_2 на трибологічні властивості	46
2.4 Порівняльний аналіз результатів з іншими покриттями	48
2.4.1 Виробничі процеси покриттів.....	50
2.4.2 Трибологічні властивості покриттів.....	51
2.4.3 Коротка характеристика та порівняння покриттів.....	52
2.5 Висновки до розділу 2	55
3 СИМУЛЯЦІЙНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ MoS_2 ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ДОМІШОК	56
3.1 Огляд програмного симуляційного середовища Virtual Coater.....	57
3.2 Налаштування і параметри магнетронного розпилення.....	58
3.3 Оптимізація складу композитного покриття TiMoS_2 на основі результатів симуляції.....	60
3.3.1 Вибір співвідношення Ti/Mo/S для забезпечення термостабільності	61

3.3.2	Дослідження додаткових легуючих елементів для підвищення стійкості до вологості.....	62
3.3.3	Аналіз впливу складу на трибологічні та фізико-механічні властивості покриття.....	64
3.4	Висновки до розділу 3	66
4	ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА	67
4.1	Оцінювання наукового ефекту	68
4.2	Розрахунок витрат на здійснення науково-дослідної роботи	71
4.2.1	Витрати на оплату праці.....	72
4.2.2	Відрахування на соціальні заходи	75
4.2.3	Сировина та матеріали.....	75
4.2.4	Розрахунок витрат на комплектуючі.....	77
4.2.5	Спецустаткування для наукових (експериментальних) робіт	78
4.2.6	Програмне забезпечення для наукових (експериментальних) робіт	79
4.2.7	Амортизація обладнання, програмних засобів та приміщень	80
4.2.8	Паливо та енергія для науково-виробничих цілей.....	81
4.2.9	Службові відрядження.....	82
4.2.10	Витрати на роботи, які виконують сторонні підприємства, установи і організації.....	83
4.2.11	Інші витрати.....	83
4.2.12	Накладні (загальновиробничі) витрати.....	83
4.3	Оцінювання важливості та наукової значимості науково-дослідної роботи	84
4.4	Висновки до розділу 4	86
	ВИСНОВКИ	87
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	89
	Додаток А (обов'язковий) Ілюстративний матеріал	95
	Додаток Б (обов'язковий) Протокол перевірки навчальної (магістерської) кваліфікаційної роботи	111

ВСТУП

Актуальність теми. У сучасному світі розвиток технологій покриттів відіграє ключову роль у вдосконаленні мікро- та наносистемної техніки, яка є основою для створення високотехнологічних пристроїв. Одним із найбільш перспективних матеріалів для цих покриттів є дисульфід молібдену (MoS_2). Завдяки своїм унікальним властивостям, зокрема низькому коефіцієнту тертя, хімічній стійкості та здатності витримувати високі температури, покриття на основі MoS_2 широко застосовуються в галузях електроніки, авіаційної техніки та енергетики.

Вивчення мікроструктурних особливостей та експлуатаційних характеристик композитних покриттів на основі MoS_2 є важливим завданням, оскільки ці покриття визначають ефективність і довговічність пристроїв в умовах значного тертя та зношування. Актуальність дослідження зумовлена також потребою у зменшенні енергетичних втрат, підвищенні стійкості до зношування та забезпеченні надійної роботи технічних систем у складних умовах експлуатації.

Крім того, використання домішок, таких як титан (Ti), для модифікації складу композитів відкриває нові можливості для підвищення їх трибологічних характеристик і зносостійкості. Це дозволяє створювати покриття з покращеними властивостями для використання в мікро- та наносистемах, які працюють у суворих умовах.

Метою роботи кваліфікаційної роботи є дослідження мікроструктур і властивостей композитного покриття на основі дисульфиду молібдену (MoS_2) із додаванням титану (Ti) для підвищення експлуатаційних характеристик та створення рекомендацій щодо оптимізації складу таких покриттів.

Задачі дослідження

- Провести аналіз сучасних методів створення композитних покриттів на основі MoS_2 та визначити їх особливості.

- Дослідити мікроструктурні характеристики покриття та вплив технологічних параметрів на їх формування.
- Вивчити фізико-механічні властивості композитного покриття, включаючи твердість, міцність і зносостійкість.
- Провести експериментальні дослідження трибологічних характеристик покриття у різних умовах експлуатації.
- Виконати симуляційне моделювання складу покриття з метою оптимізації його властивостей для зменшення тертя та підвищення довговічності.
- Розробити рекомендації щодо використання композитного покриття на основі MoS_2 у мікро- та наносистемах.

Об'єктом дослідження є композитне покриття на основі MoS_2 .

Предметом дослідження є його мікроструктурні та фізико-механічні властивості, які впливають на довговічність та ефективність роботи в умовах тертя в мікро- та нанопристроях.

Наукова новизною є Проведення аналізу та перегляді сучасних методів створення композитних покриттів на основі дисульфиду молібдену (MoS_2), що дозволяє визначити оптимальні технологічні підходи до нанесення покриттів із додаванням титану (Ti). Очікується, що це сприятиме створенню покриттів із підвищеною адгезією до підкладки, більшою твердістю та зносостійкістю, що є важливим для мікро- та наносистемних застосувань.

Дослідження впливу мікроструктури композитного покриття на фізико-механічні та трибологічні властивості. Це дозволяє створити покриття з низьким коефіцієнтом тертя в діапазоні 0,01–0,05 і забезпечить високу термостабільність до температури 600°C , що значно розширить можливості їхнього використання в умовах високого навантаження.

Проведення математичного моделювання складу покриття $\text{MoS}_2\text{-Ti}$, яке дозволяє оптимізувати співвідношення компонентів для досягнення високих експлуатаційних характеристик. Введення домішок титану у співвідношенні 10–

15% забезпечить покращення трибологічних властивостей, підвищення стійкості до тріщин та довговічності покриттів у складних умовах експлуатації.

Практичною значущістю є проведення аналізу та розгляд можливостей впровадження сучасних технологій створення композитних покриттів на основі дисульфиду молібдену (MoS_2), що дозволяє розробити методики формування покриттів із додаванням 10–15% титану (Ti). Це надасть змогу досягти твердості покриттів у межах 8–12 ГПа та покращити їхню адгезію до підкладки на 20–25%, що сприятиме підвищенню надійності мікро- та наносистем.

Дослідження впливу мікроструктурних характеристик покриттів MoS_2 -Ti дозволить досягти зменшення коефіцієнта тертя до рівня 0,01–0,05 і підвищення зносостійкості покриттів. Очікується, що швидкість зносу знизиться до 10^{-6} – 10^{-7} $\text{мм}^3/\text{Нм}$ у сухих умовах, що суттєво збільшить довговічність пристроїв, де ці покриття будуть використовуватись.

Математичне моделювання складу композитного покриття MoS_2 -Ti дозволить оптимізувати співвідношення компонентів для забезпечення термостабільності покриттів до температури 600°C . Це дозволить використовувати такі покриття в умовах високих температур і значних механічних навантажень, що відкрис нові можливості для їх застосування в авіаційній, енергетичній та інших високотехнологічних галузях.

Апробація та публікації. Отримані результати в МКР були апробовані на IX Міжнародній науково-практичній конференції «Сучасні проблеми інфокомунікацій, радіоелектроніки та наносистем (СПРН-2023)». За результатами цієї конференції була опублікована 1 стаття автора [1].

1 ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПОЗИТНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ MoS_2

1.1 Властивості дисульфиду молібдену (MoS_2)

Дисульфід молібдену належить до класу матеріалів, які називаються «дихалькогеніди перехідних металів» (ДМХМ). Матеріали цього класу мають хімічну формулу MX_2 , де М — атом перехідного металу (групи 4-12 у періодичній таблиці), а Х — халькоген (група 16). Хімічна формула дисульфиду молібдену - MoS_2 .

Кристалічна структура дисульфиду молібдену (MoS_2) має форму гексагональної площини з атомів S по обидві сторони від гексагональної площини з атомів Mo. Ці потрійні площини накладаються одна на одну, з сильними ковалентними зв'язками між атомами Mo та S, але слабкі ван-дер-ваальсові зв'язки змушують утримувати шари разом. Це дозволяє їх механічно відокремити для формування двовимірних листів MoS_2 .

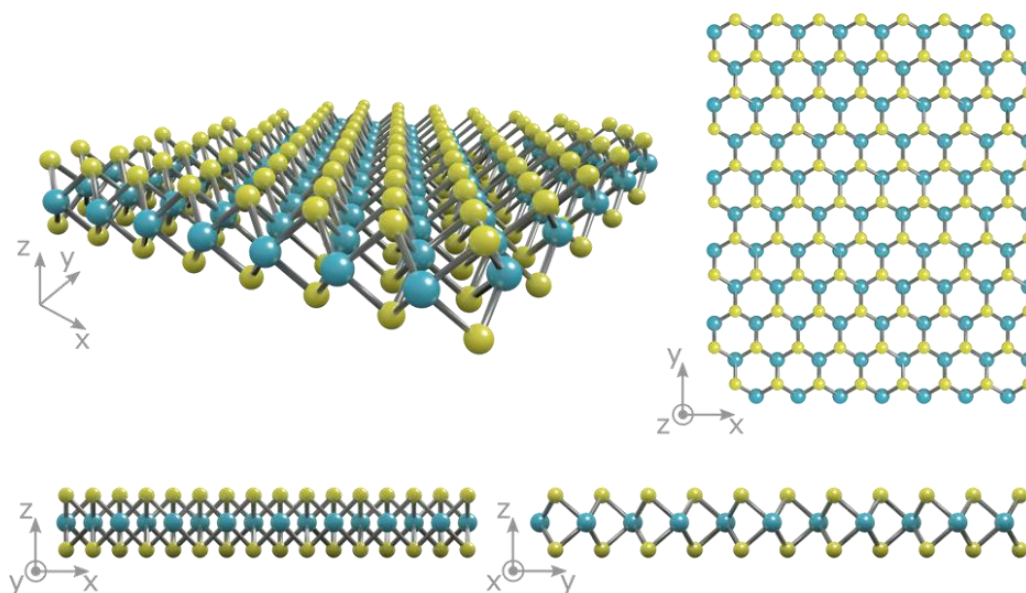


Рисунок 1.1 - Кристалічна структура моношару MoS_2 показує шар атомів молібдену (синій), затиснутий між двома шарами атомів сірки (жовтий) [2]

MoS₂ існує у кількох фазах, які відрізняються кристалічною структурою та властивостями. Найпоширенішою є 2H-фаза, яка є термодинамічно стабільною і має напівпровідникові властивості. Металічна 1T-фаза може бути отримана шляхом хімічної модифікації, наприклад, введенням літієвих іонів. Рідкісна 3R-фаза має іншу тригональну структуру та специфічні електронні характеристики.

Після величезного дослідницького інтересу до графену, MoS₂ був наступним двовимірним матеріалом, який досліджувався для потенційного застосування в пристроях. Завдяки своїй прямій забороненій зоні він має велику перевагу перед графеном для кількох застосувань, включаючи оптичні датчики та польові транзистори. Шарувата структура дозволяє MoS₂ утворювати нанолісти, які активно використовуються в нанотехнологіях. Матеріал знаходить застосування у транзисторах, суперконденсаторах, батареях, сенсорах, оптоелектронних пристроях, а також у каталітичних процесах, зокрема для водневого отримання. Унікальне поєднання властивостей робить MoS₂ перспективним для використання у високотехнологічних галузях [3].

1.1.1 Об'ємні властивості

MoS₂ зустрічається в природі як мінерал «молібденіт». У своїй масовій формі він виглядає як темна, блискуча тверда речовина. Слабка взаємодія між шарами дозволяє листам легко ковзати один по одному, тому його часто використовують як мастило. Його також можна використовувати як альтернативу графіту в умовах високого вакууму, але він має нижчу максимальну робочу температуру, ніж графіт. Масовий MoS₂ є напівпровідником із непрямою забороненою зоною ~1,2 еВ, і тому представляє обмежений інтерес для оптоелектронної промисловості [4].

Об'ємні властивості композитних покриттів на основі MoS₂ визначають їх здатність протистояти механічним, термічним і хімічним впливам. Щільність покриття залежить від співвідношення компонентів композиту та ступеня

пористості: для чистого MoS_2 вона становить близько $5,06 \text{ г/см}^3$, однак у композитах цей показник варіюється залежно від додаткових матеріалів. Модуль пружності покриттів визначає їх стійкість до деформацій і зазвичай є нижчим, ніж у металів чи кераміки, що забезпечує гнучкість композиту.

Механічна міцність композитів на основі MoS_2 залежить від їхньої структури. Хоча сам MoS_2 характеризується невисокою твердістю і обмеженою міцністю на розтяг, додавання зміцнювальних фаз дозволяє значно покращити ці характеристики. Покриття MoS_2 за своєю природою є крихкими, але введення металевих чи керамічних добавок підвищує їхню пластичність.

Пористість є важливим параметром, що впливає на міцність та зносостійкість покриттів. Зниження пористості шляхом оптимізації технологічного процесу дозволяє підвищити їхню механічну стабільність. Теплопровідність чистого MoS_2 є низькою, що може бути як перевагою, так і недоліком, залежно від умов експлуатації. У композитах її можна змінювати додаванням матеріалів з високою теплопровідністю, таких як мідь або графен [5].

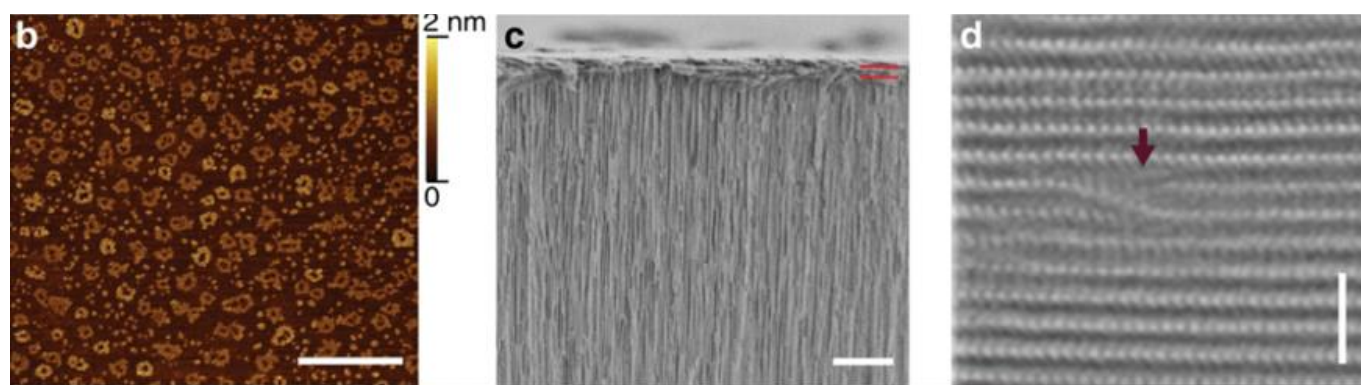


Рисунок 1.2 - b Топографічні атомно-силові мікрофотографії попередньо підготовлених пористих зразків MoS_2 . c Зображення SEM поперечного перерізу ламінатної мембрани NS/ND, закріпленої на фільтрі з анодисового оксиду алюмінію. d Показове зображення високої роздільної здатності HAADF STEM поперечного перерізу зразку, що демонструє відстань між шарами $6,2 \text{ Å}$ та дефекти укладання, викликані пористістю нанолістів [5]

Однією з ключових властивостей є термостійкість: чистий MoS_2 окислюється при температурах понад $400\text{--}450^\circ\text{C}$, але композити можуть демонструвати підвищену термостабільність завдяки модифікації складу. Висока зносостійкість є характерною для покриттів на основі MoS_2 через низький коефіцієнт тертя, і вона може бути додатково покращена за рахунок введення твердих частинок, таких як Al_2O_3 або TiC .

Стійкість до корозії MoS_2 забезпечує його довговічність у багатьох агресивних середовищах, а в композитах ця властивість може посилюватися завдяки використанню спеціальних добавок. Загалом, об'ємні властивості покриттів залежать від технології їх нанесення, яка впливає на структуру, пористість і текстуру матеріалу [6].

1.1.2 Оптичні та електричні властивості

Окремі шари MoS_2 мають кардинально інші властивості в порівнянні з основною масою. Видалення міжшарових взаємодій і обмеження електронів в одній площині призводить до утворення прямої забороненої зони зі збільшеною енергією $\sim 1,89$ еВ (видиме червоне). Один моношар MoS_2 може поглинати 10% падаючого світла з енергією, що перевищує заборонену зону [7].

Ще однією важливою характеристикою є рухливість носіїв заряду, яка для MoS_2 залежить від чистоти матеріалу та технології нанесення. У чистому вигляді вона може досягати $200\text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ при кімнатній температурі. Композити, які поєднують MoS_2 з іншими матеріалами, дозволяють зберегти або навіть підвищити цей показник.

Оптичні та електричні властивості також залежать від технології осадження покриття, наприклад, магнетронного напилення, хімічного осадження з парової фази (CVD) чи термічного випаровування. Ці методи дозволяють контролювати товщину шару, розмір зерен і дефектну структуру, що впливає на поглинання світла, ширину забороненої зони та провідність.

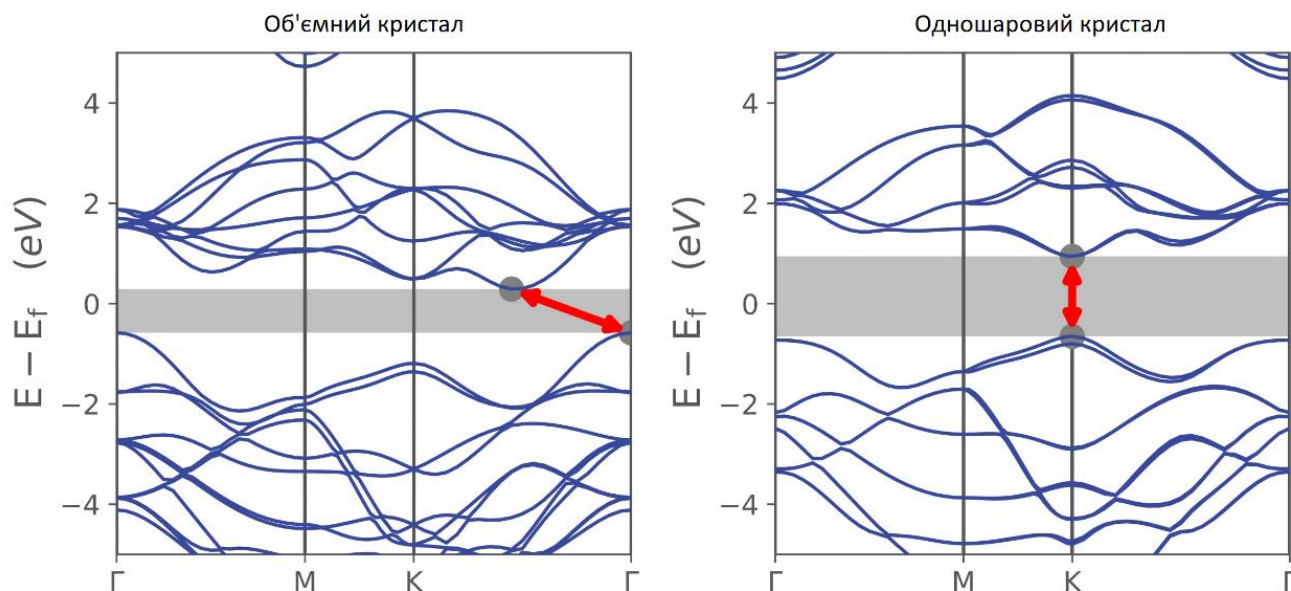


Рисунок 1.3 - Діаграма зонної структури об'ємного (ліворуч) і моношару MoS_2 (праворуч), що показує перехід від непрямой до прямої забороненої зони, що супроводжується розширенням забороненої зони [8]

У порівнянні з об'ємним кристалом спостерігається 1000-кратне збільшення інтенсивності фотолюмінесценції, але воно залишається відносно слабким - з квантовим виходом фотолюмінесценції близько 0,4%. Однак це можна значно збільшити (до понад 95%) шляхом видалення дефектів, які відповідають за безвипромінювальну рекомбінацію.

Ширина забороненої зони може бути налаштована шляхом введення деформації в структуру. Спостерігалось збільшення забороненої зони на 300 меВ на 1% двовісної деформації стиснення, застосованої до тришарового MoS_2 . Застосування вертикального електричного поля також було запропоновано як метод зменшення забороненої зони в 2D TMDCs - потенційно до нуля, тим самим перемикаючи структуру з напівпровідникової на металеву [9].

Спектри фотолюмінесценції моношарів MoS_2 показують два екситонні піки: один при $\sim 1,92$ еВ (А-екситон), а інший при $\sim 2,08$ еВ (В-екситон). Це пов'язано з розщепленням валентної зони в К-точці (в зоні Бріллюена) через спин-орбітальний

зв'язок, уможливлуючи два оптично активних переходи. Енергія зв'язку екситонів становить >500 меВ. Тому вони стійкі до високих температур.

Введення надлишку електронів у MoS_2 (за допомогою електричного або хімічного легування) може спричинити утворення трионів (заряджених екситонів), які складаються з двох електронів і однієї дірки. Вони виглядають як піки в спектрах поглинання та ФЛ, зміщені в червоний колір на ~ 40 меВ відносно піку екситону А (регулюється через концентрацію легування). Хоча енергія зв'язку трионів набагато нижча, ніж енергія зв'язку екситонів (приблизно 20 меВ), вони мають незначний внесок в оптичні властивості плівок MoS_2 при кімнатній температурі [10].

Моношарові транзистори MoS_2 зазвичай демонструють поведінку n-типу, з рухливістю носіїв приблизно $350 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ (або ~ 500 разів нижче, ніж графен). Однак, коли виготовлені в польових транзисторах, вони можуть відображати великі коефіцієнти ввімкнення/вимкнення, що робить їх привабливими для високоефективних комутаційних і логічних схем [11].

1.1.3 Механічні властивості

Механічні властивості композитних покриттів на основі MoS_2 відіграють важливу роль у їхньому використанні для підвищення зносостійкості, стійкості до навантажень і довговічності в умовах експлуатації. Основними параметрами, що характеризують механічні властивості, є твердість, модуль пружності, міцність, пластичність і зносостійкість.

Твердість композитних покриттів залежить від складу та технології їхнього нанесення. Для чистого MoS_2 твердість становить близько **0,5–1 ГПа** (нанотвердість), що є відносно низьким показником. Додавання металевих (Ni, Ti, W) або керамічних (Al_2O_3 , TiC) компонентів дозволяє підвищити твердість до **8–12 ГПа**, залежно від співвідношення фаз і методу осадження [12].

Модуль пружності (E), який характеризує опір матеріалу деформаціям, для чистого MoS_2 становить приблизно **100–200 ГПа**. Композитні покриття можуть демонструвати модуль пружності в діапазоні **150–300 ГПа** залежно від складу і мікроструктури.

Міцність на розтяг (σ) для чистого MoS_2 є невисокою і зазвичай становить близько **50–100 МПа**. У композитах цей показник може досягати **200–400 МПа** за рахунок введення зміцнювальних фаз або оптимізації структури.

Пластичність композитів залежить від наявності металевих компонентів. Чистий MoS_2 є крихким, але додавання, наприклад, нікелю або титану, дозволяє підвищити пластичність покриттів, що особливо важливо для умов змінних механічних навантажень.

Зносостійкість є однією з ключових характеристик покриттів на основі MoS_2 . Коефіцієнт тертя чистого MoS_2 становить **0,02–0,1** у сухих умовах, що робить його ефективним у застосуванні для зниження тертя. Композити демонструють подібні або навіть нижчі коефіцієнти тертя, а також значно кращу стійкість до абразивного зносу, що підвищує їх ресурс у 2–3 рази порівняно з чистим MoS_2 .

Пористість композитних покриттів впливає на їх механічну міцність. Для якісно нанесених покриттів пористість зазвичай не перевищує **2–5%**, тоді як для технологій із нижчою точністю може досягати **10–15%**, що знижує міцність і зносостійкість [13].

Стійкість до впливу високих температур є важливою властивістю для багатьох застосувань. Чистий MoS_2 втрачає свої механічні властивості при температурах понад **400°C**, однак у композитах цей поріг може бути збільшений до **600–700°C** завдяки введенню термостабільних компонентів.

Ці числові характеристики підтверджують, що механічні властивості композитних покриттів на основі MoS_2 можуть бути значно покращені завдяки використанню різних добавок і оптимізації технології нанесення. Це робить їх

універсальними для застосування в умовах високих механічних навантажень і підвищеного зносу.

Моношари MoS_2 є гнучкими, і було показано, що тонкоплівкові польові транзистори зберігають свої електронні властивості при згинанні до радіуса кривизни 0,75 мм. Вони мають жорсткість, порівнянну зі сталлю, і вищу міцність на розрив, ніж гнучкі пластики (такі як поліімід (PI) і полідиметилсилоксан (PDMS)), що робить їх особливо придатними для гнучкої електроніки.

При близько $35 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}$ теплопровідність моношарів MoS_2 приблизно в 100 разів нижча, ніж у графену [14].

1.1.4 Валеитронні властивості

MoS_2 та інші 2D TMDC можуть запропонувати погляд до технологій поза електронікою, де ступені свободи (крім заряду) можуть використовуватися для зберігання та/або обробки інформації. Електронна смугова структура MoS_2 відображає енергетичні максимуми валентної зони, і мінімуми зони провідності в точках K і K' (часто називають -K) так звані зони Бріллюена. Ці дві дискретні «западини» мають однакову енергетичну щільність, але дискретні за положенням у просторі імпульсу.

Оптичні переходи в цих рівнях вимагають зміни кутового моменту на +1 для K-точки та -1 для K'-точки [15]. Отже, екситони можуть вибірково збуджуватися в западину циркулярно поляризованим світлом: правополяризоване світло (σ^+) збуджує екситони в западині K, а лівополяризоване світло (σ^-) збуджує екситони в западині K'.

Навпаки, світло, що випромінюється від рекомбінації екситонів у западині K, буде σ^+ поляризованим, а світло, що випромінюється від рекомбінації екситонів у западині K', буде σ^- поляризованим. Оскільки до цих западин можна звертатися незалежно, вони представляють ступінь свободи, званий «псевдоспіном западини», який можна використовувати в пристроях «valleytronic».

Крім того, валентна зона спін-орбітального розщеплення в точках К і К' має протилежні знаки обертання для кожної з западини. Наприклад, А-екситон у западині К складається з електрона зі спіном вгору та дірки зі спіном вниз, а В-екситон западини К має електрон зі спіном вниз і дірку зі спіном вгору. Для екситонів А і В в западині К' складові носії заряду мають протилежний спін.

Це означає, що западині псевдоспінові та спінові ступені свободи носіїв заряду пов'язані (спін-западинний зв'язок), а спінові та западинні властивості носіїв заряду можна вибирати оптично – за допомогою вибору поляризації збудження (для вибору западини) та енергії (для вибору екситона А або В - а отже, і спіна).

	σ^+ (K valley)	σ^- (K' valley)
E_A	$\uparrow e \downarrow h$	$\downarrow e \uparrow h$
E_B	$\downarrow e \uparrow h$	$\uparrow e \downarrow h$

Рисунок 1.4 – Схема носія заряду що обертається після вибіркового оптичного збудження [16]

При застосуванні електричного поля в площині екситони можуть стати дисоційованими, при цьому носії зберігають свої характеристики западини та спіну. Електрони (і дірки) у протилежних западинах рухатимуться в протилежних напрямках, перпендикулярних до поля. Це називається «ефектом западини Холла» і може лягти в основу майбутніх технологій, де більше інформації може бути закодовано на електронах завдяки цим додатковим ступеням свободи.

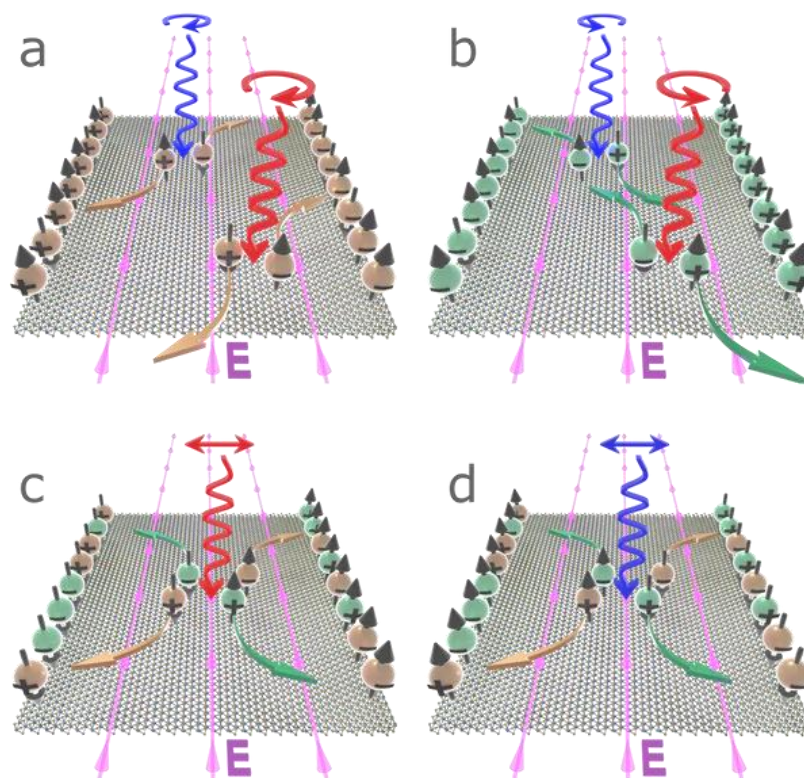


Рисунок 1.5 - а) σ^+ циркулярно поляризоване світло, що падає на моношар MoS_2 , збуджує носії заряду в К-западині (помаранчеві сфери). Світло з енергією, виродженою з А-екситоном (червона стрілка), збуджує електрони зі спіном вгору та дірки зі спіном вниз. Навпаки, світло, що відповідає В-екситону (синя стрілка), збуджує електрони зі спіном вниз і дірки зі спіном вгору. Електричне поле в площині змушує електрони накопичуватися на одному краю шару, а дірки – на іншому.

б) σ -світло збуджує носії заряду в К'-западині (зелений) із спінами, протилежними спінам у К-западині, при цьому заряди також накопичуються на протилежних краях.

в) Лінійно поляризоване світло з енергією, виродженою з А-екситоном, збуджує заряди в обох западинах, при цьому носії з однаковими спінами збираються на тому самому краю шару.

г) Подібна ситуація реалізується після збудження лінійно поляризованим світлом, виродженим В-екситоном, зі спінами, що мігрують до протилежних сторін шару

1.2 Методи створення композитних покриттів на основі MoS_2

Механічне легування (Mechanical Alloying) відбувається за умов механічного змішування порошків, таких як дисульфід молібдену (MoS_2) з металевими компонентами, наприклад, алюмінієм (Al) або міддю (Cu), що приводить до інтенсивної деформації та інтеграції компонентів у композитну структуру [18].

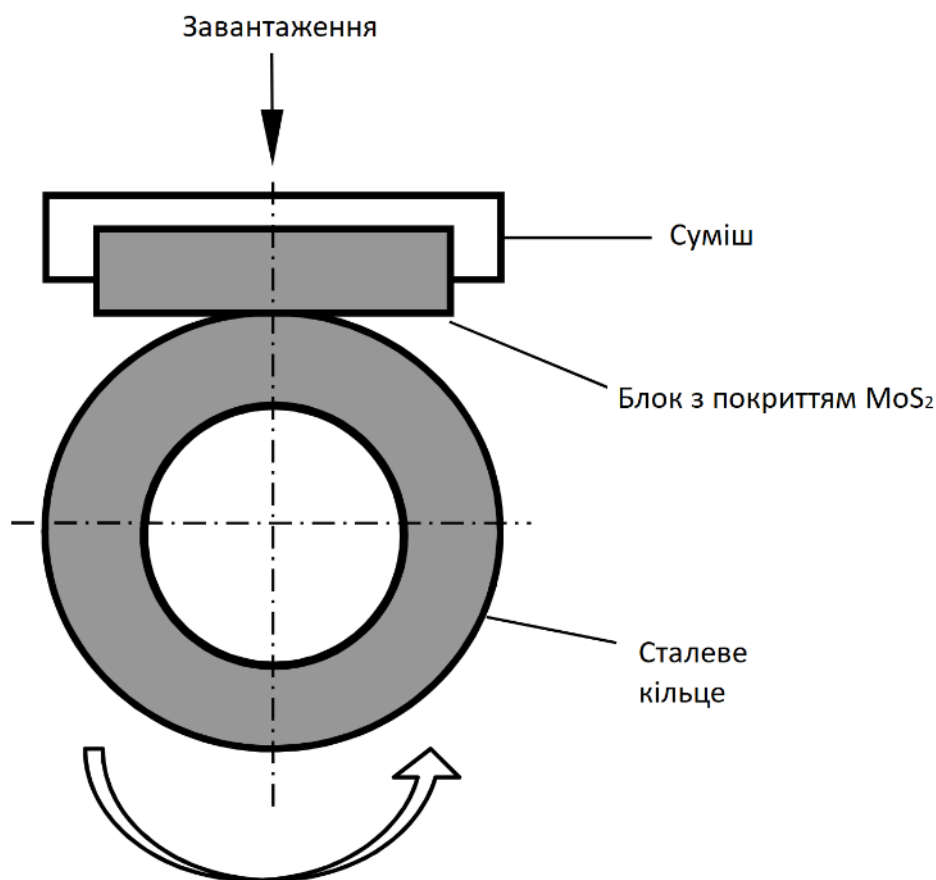


Рисунок 1.6 – Схематичне зображення механічного легування із використанням блоку з покриттям та сталевого кільця [18]

Температурний режим для цього процесу зазвичай залишається відносно низьким (кімнатна температура), оскільки основна енергія досягається через механічний вплив, що дозволяє уникнути плавлення матеріалів. Основним фізичним параметром тут є швидкість змішування, яка може досягати кількох

тисяч обертів на хвилину, що призводить до утворення нанокристалічної структури.

Серед переваг цього методу є можливість створення однорідних матеріалів на нанорівні, що забезпечує точний контроль за структурою. Проте, процес механічного легування є досить енергоємним і тривалим, що можна вважати його недоліком.

Метод лазерного осадження (Laser Deposition) використовує лазери, які генерують температуру в діапазоні від 1500°C до 3000°C для плавлення MoS_2 та інших легуючих компонентів, таких як нікель (Ni) або титан (Ti). Завдяки такій високій температурі відбувається інтенсивне випаровування і подальше осадження на підкладку. Температура підкладки може підтримуватися на рівні 200°C – 500°C , щоб покращити адгезію і запобігти утворенню тріщин. [19]

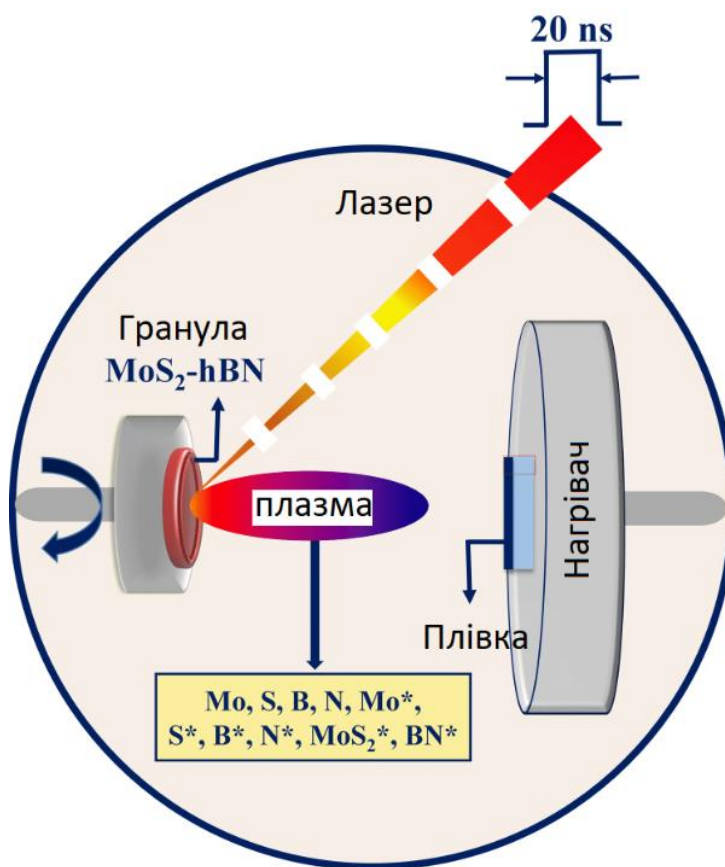


Рисунок 1.7 – Схематичне зображення лазерного осадження із використанням імпульсного лазера [19]

Перевагою цього методу є точний контроль за процесом нанесення, а також можливість створення тонких покриттів з низькою пористістю.

Однак, лазерне осадження вимагає складного та дорогого обладнання, а також високої точності в управлінні процесом, що є його недоліками.

Фрикційне перемішувальне зварювання (Friction Stir Processing) застосовує механічне тертя, яке підвищує температуру до 400°C – 800°C на місці взаємодії інструменту з поверхнею, що забезпечує пластичну деформацію матеріалів. Для створення композитів використовують метали, такі як алюмінієві (Al) та магнієві (Mg) сплави, які в поєднанні з MoS_2 забезпечують високі механічні властивості. Під час цього процесу важливим фактором є рівномірний розподіл частинок MoS_2 у металевій матриці для покращення зносостійкості. [20]

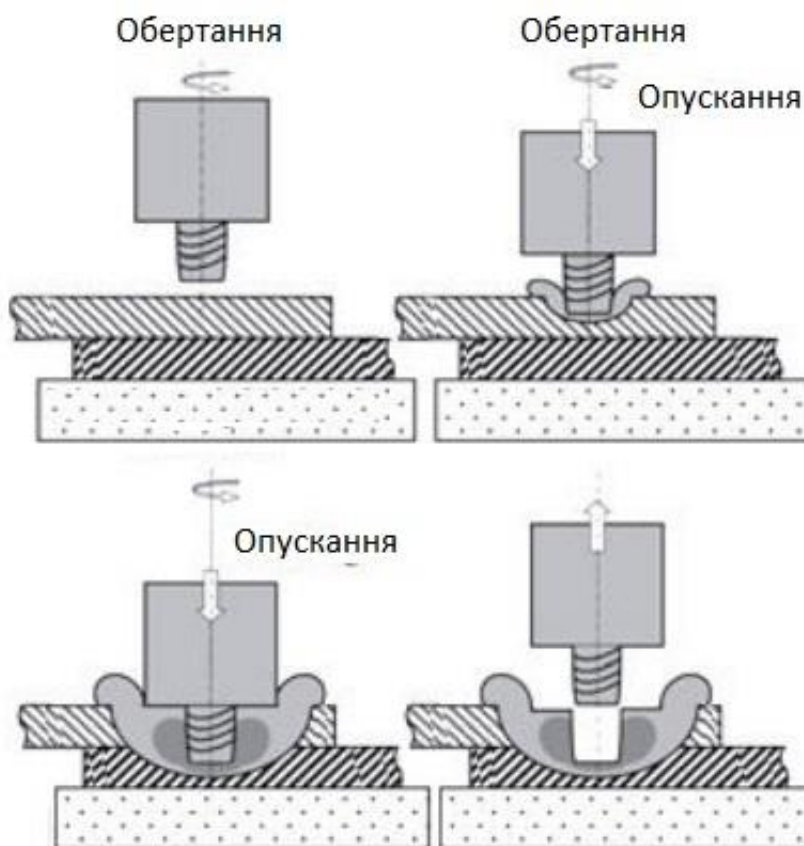


Рисунок 1.8 – Схематичне зображення фрикційно-перемішувального зварювання [20]

Основною перевагою є підвищення твердості та стійкості до зношування, зберігаючи при цьому початкові властивості підкладки. Недоліком цього методу є складність у контролі мікроструктури на невеликій глибині, що може вплинути на однорідність покриття.

Електроіскрове легування (Electrospark Deposition, ESD) Електроіскрове легування (Electrospark Deposition, ESD) відбувається при генеруванні іскри за температури до 3000°C , що дозволяє розплавити MoS_2 та металеві порошки, такі як вольфрам (W) або кобальт (Co). Іскри генеруються між електродом і поверхнею підкладки. Процес іскрового легування ефективний при нанесенні покриттів із товщиною кілька мікрометрів, що забезпечує високу адгезію і низький коефіцієнт тертя [21].

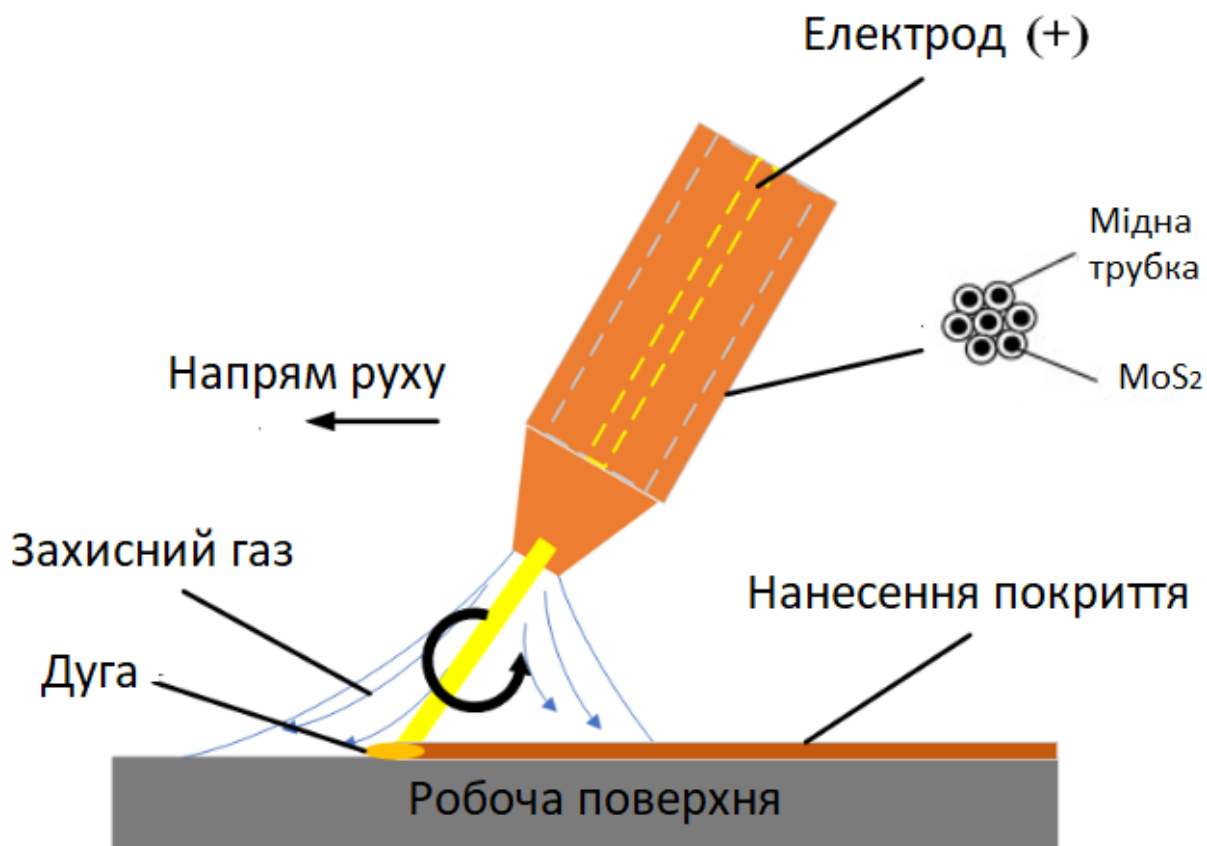


Рисунок 1.9 – Схематичне зображення нанесення шару MoS_2 шляхом електроіскрового легування [21]

Цей метод дозволяє швидко наносити покриття, не потребуючи високих температур, що є однією з його переваг. Недоліками методу є обмежена товщина нанесеного шару і потреба в ретельному контролі якості зчеплення покриття з основою.

Імпульсне лазерне осадження (*Pulsed Laser Deposition, PLD*) базується на випаровуванні MoS_2 при дуже високих температурах — до $10,000^\circ\text{C}$ на поверхні матеріалу через імпульс лазера. Осадження відбувається у вакуумі або в контрольованій атмосфері інертного газу, наприклад, аргону (Ar). Підкладка зазвичай підігрівається до температури 300°C – 600°C , що допомагає контролювати структуру покриття і покращити його фізичні властивості, такі як твердість і стійкість до окиснення [22].

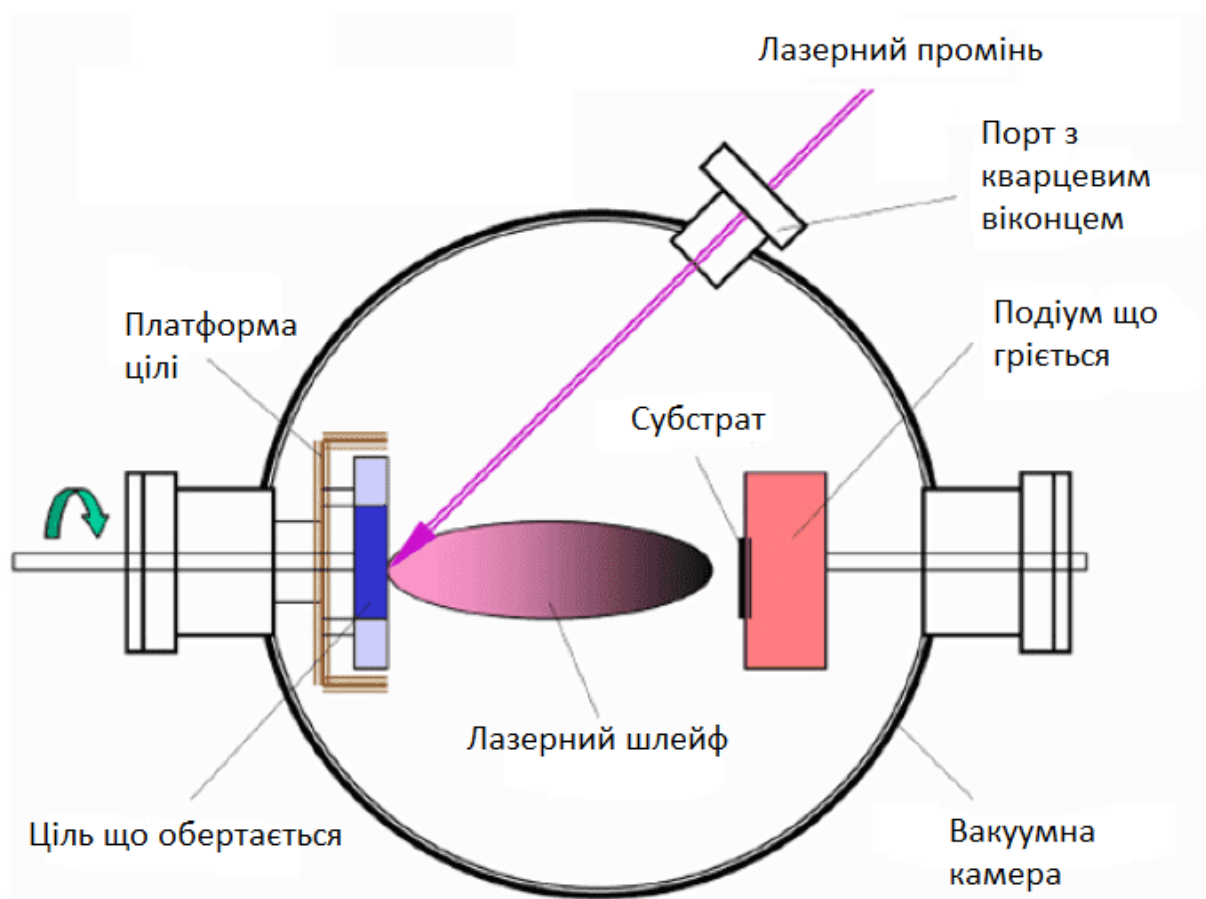


Рисунок 1.10 - Принципова схема пристрою PLD [22]

Цей метод забезпечує високоточний контроль за товщиною та складом покриття, що робить його ефективним для нанесення тонких і чистих плівок. Перевага методу полягає у його здатності створювати покриття з точною товщиною та структурою. Однак, він вимагає складного обладнання і високих затрат на організацію процесу, що є його недоліком.

Плазмово-електролітне оксидування (PEO) використовується для створення оксидних покриттів з частинками MoS_2 . У цьому процесі, при подачі високої напруги, формується плазма, яка окислює поверхню матеріалу, зокрема, алюмінієві сплави. Температура під час PEO може досягати 2000°C , що сприяє утворенню оксидних фаз із вбудованими частинками дисульфиду молібдену, забезпечуючи стійкість до корозії [23].

Однією з основних переваг цього методу є висока стійкість до корозії, оскільки в результаті процесу утворюється щільний оксидний шар на поверхні матеріалу. Додавання частинок MoS_2 додатково підвищує захист від корозійного середовища, що робить цей метод особливо ефективним у агресивних умовах, таких як морське середовище або застосування в авіаційній техніці. Ще однією важливою перевагою є значне зниження коефіцієнта тертя. Завдяки низькому тертю MoS_2 (коефіцієнт тертя може бути в межах 0.02 – 0.1), це покриття дозволяє значно зменшити зношуваність компонентів, що працюють у безмастильних умовах, подовжуючи термін їх експлуатації.

Але існують і певні недоліки методу PEO. Наприклад, керування товщиною оксидного шару може бути досить складним, що призводить до нерівномірності покриття. Висока температура процесу, яка може досягати 2000°C , вимагає спеціального обладнання для стійкості матеріалів підкладки, що підвищує витрати та ускладнює процес. Внаслідок високих температур і швидкого охолодження також можуть утворюватися мікротріщини у покритті, що погіршує його механічні властивості. До того ж, для здійснення процесу необхідне високовартісне

обладнання, яке потребує великої енерговитратності, що підвищує загальні витрати на процес.

Композитні покриття на основі MoS_2 відіграють важливу роль у мікро- та наносистемній техніці завдяки своїм унікальним хімічним властивостям. Вони забезпечують зниження коефіцієнта тертя до 0.02-0.1 в умовах без змащування, що робить їх ідеальними для застосувань у мікроелектромеханічних системах (MEMS) та нанотехнологіях, де низький рівень тертя є критичним для підвищення продуктивності та надійності пристроїв.

1.3 Фізико-механічні та трибологічні характеристики MoS_2 покриттів

Покриття з дисульфиду молібдену (MoS_2) добре відомі своїми чудовими трибологічними та фізико-механічними характеристиками, що робить їх придатними для високопродуктивних застосувань, особливо в сухих і вакуумних середовищах. Ці покриття широко використовуються в аерокосмічній, автомобільній та промисловій промисловості завдяки їх низькому тертю, помірній твердості та стійкості до корозії [24].

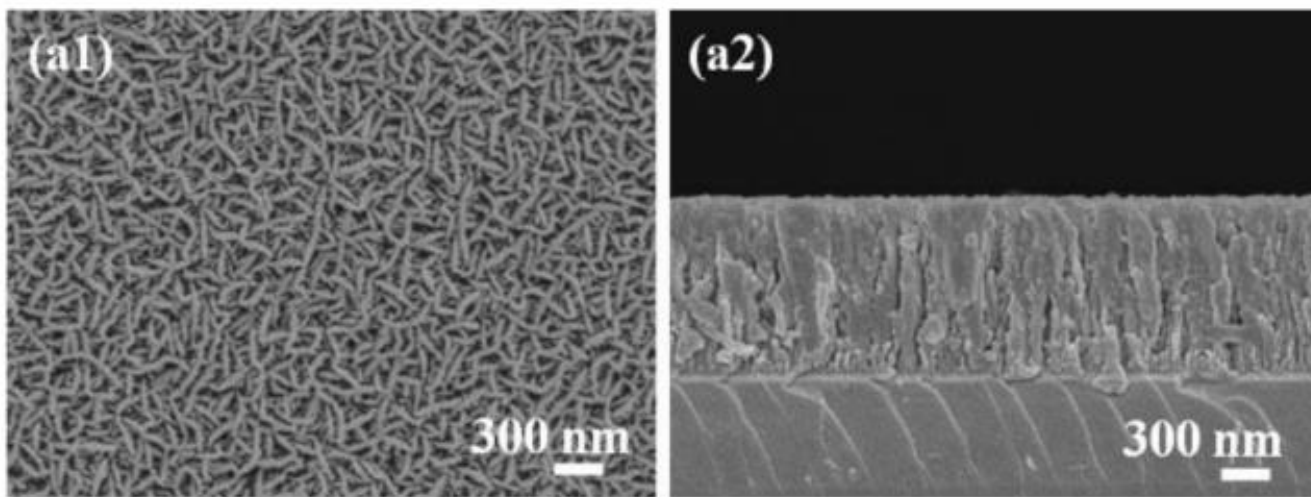


Рисунок 1.11 - Пориста та стовпчаста структурою чистої плівки MoS_2 [24]

MoS₂ має гексагональну кристалічну структуру, в якій атоми молібдену розташовані між двома шарами атомів сірки, утворюючи потрійні шари. Слабкі ван-дер-ваальсові сили між цими шарами сприяють легкому зсуву їх відносно один одного, що забезпечує змащувальні властивості матеріалу.

Твердість чистих покриттів MoS₂ зазвичай становить **1–2 ГПа**, що є достатнім для багатьох застосувань, але обмежує їх використання в умовах високих навантажень. Щоб покращити механічні властивості, покриття можна модифікувати шляхом легування або формування багатошарових структур. Наприклад, легування такими елементами, як титан (Ti), азот (N) або створення багатошарових систем (наприклад, із введенням шарів MoSN), дозволяє збільшити твердість до **10 ГПа**. Такі покриття мають значно підвищену стійкість до розтріскування та здатність витримувати високі механічні навантаження.

Модуль пружності, який визначає стійкість матеріалу до деформацій, для MoS₂ становить **100–120 ГПа**. Це значення нижче, ніж у більшості традиційних металевих або керамічних матеріалів, що підкреслює гнучкість і адаптивність MoS₂. Особливо це важливо для застосувань у трибологічних середовищах, де покриття піддаються циклічним механічним навантаженням, і потрібно уникати появи тріщин або інших дефектів.

Трибологічні властивості MoS₂ є одними з найважливіших його характеристик. Коефіцієнт тертя (CoF) MoS₂ знаходиться в діапазоні **0,01–0,05** у сухих умовах, що є надзвичайно низьким показником. Ця властивість виникає завдяки легкому зсуву між слабо зв'язаними шарами сірки, які мінімізують втрати енергії під час руху. В умовах змінної вологості або вакууму низький CoF також зберігається, що робить MoS₂ ідеальним для змащування в екстремальних умовах, наприклад, у космічній техніці або високошвидкісних механізмах [25].

Покриття MoS₂ мають високу зносостійкість завдяки шаруватій структурі, яка забезпечує рівномірне стирання. Модифіковані покриття із додаванням твердих фаз або металів (наприклад, нікелю чи хрому) демонструють покращену

стійкість до абразивного зносу, що збільшує їхній строк служби. У трибологічних умовах MoS_2 може втрачати свої мастильні властивості при температурах вище $400\text{--}450^\circ\text{C}$, де він починає окислюватися до MoO_3 . Для розширення температурного діапазону використання розробляються модифіковані покриття, які витримують температури до 600°C .

Таким чином, MoS_2 є ефективним матеріалом для зменшення тертя, забезпечення довговічності механізмів і підвищення їх енергоефективності, особливо після відповідної модифікації або легування [26].

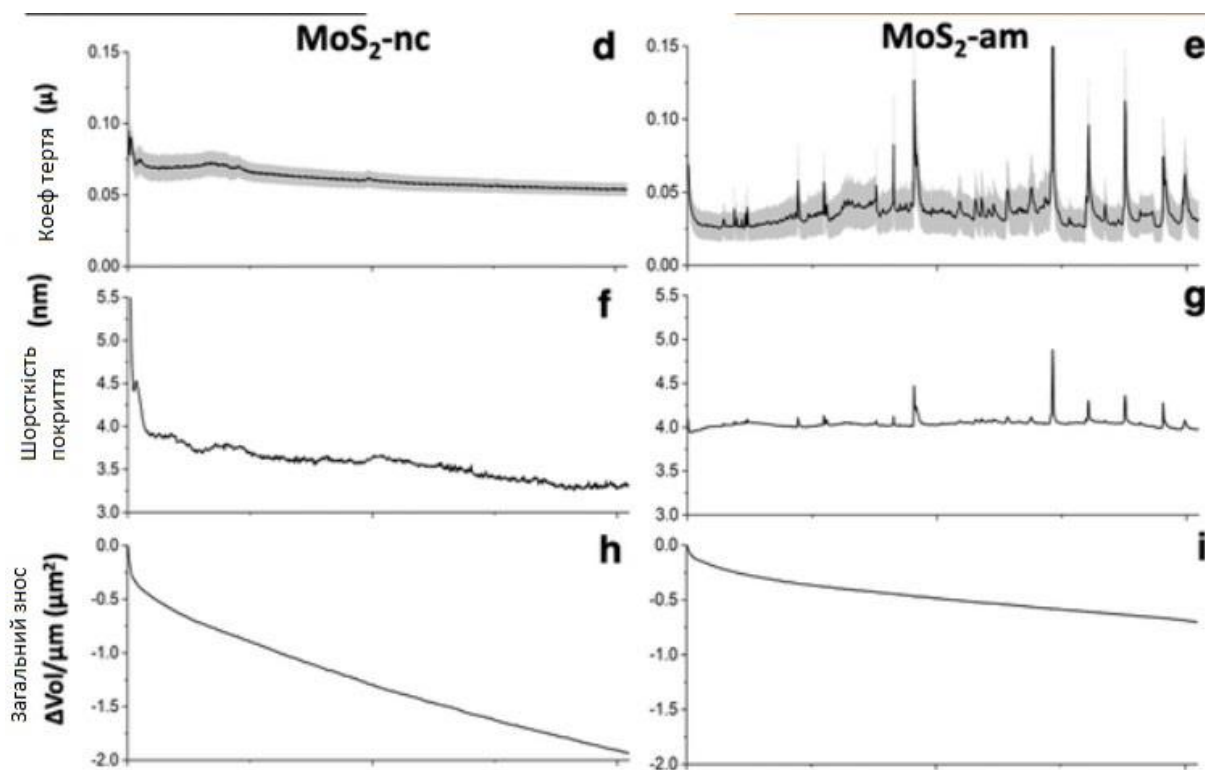


Рисунок 1.12 – Трибологічні характеристики нанокompозитного та аморфного покриттів MoS_2 методом силової мікроскопії тертя сталевим штапиком AISI 440C, прикріплений до консолі AFM високої жорсткості ($64 \pm 4 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$); d,e – коефіцієнт зміни тертя (чорний) зі стандартним відхиленням (сірий); f,g – зміна середньоквадратичного шорсткості; h,i – сукупний обсяг зносу на мкм пройденого шляху [26]

Покриття MoS_2 також виявляють високу зносостійкість зі швидкістю зношування зазвичай порядку 10^{-6} до 10^{-7} $\text{мм}^3/\text{Нм}$ у сухих умовах. Однак у вологому середовищі швидкість зношування має тенденцію до збільшення через те, що водяна пара реагує з шарами сірки, утворюючи оксид молібдену, що погіршує трибологічні характеристики. Тим не менш, поєднання MoS_2 із твердими шарами, такими як MoSN або MoS_2 , легований Ti , значно покращує його продуктивність у вологому середовищі, зменшуючи сприйнятливості до окислення.

Покриття MoS_2 можуть витримувати високі температури, функціонуючи до 400°C в інертних середовищах, хоча їх ефективність може погіршитися на повітрі вище 300°C через окислення. Під впливом кисню MoS_2 перетворюється на оксид молібдену (MoO_3), який має гірші трибологічні властивості. Однак у вакуумі чи інертному середовищі MoS_2 зберігає низьке тертя та зносостійкість навіть за підвищених температур [26].

1.4 Використання MoS_2 покриттів у мікро- та наносистемній техніці

MoS_2 інтенсивно вивчався протягом майже 10 років, і було досліджено багато потенційних застосувань. Нижче наведено їх добірку.

Польові транзистори. Велика пряма заборонена зона та відносно висока мобільність носіїв у MoS_2 роблять його очевидним вибором для польових транзисторів. Ранні експерименти з одношаровими транзисторами MoS_2 показали багатообіцяючі, із зафіксованою рухливістю $200 \text{ см}^2\text{В-1с-1}$ і співвідношенням включення/вимкнення $\sim 10^8$. Було припущено, що такі пристрої можуть перевершувати кремнієві FET за кількома ключовими показниками, такими як енергоефективність і коефіцієнт увімкнення/вимкнення. Однак вони, як правило, демонструють лише характеристики n-типу. Було докладено багато зусиль для

покращення польових транзисторів шляхом зменшення взаємодії підкладки, покращення електричної інжекції та реалізації амбіполярного транспорту [27].

Фотодетектори. Властивості забороненої зони MoS_2 також піддаються застосуванню в оптоелектроніці.

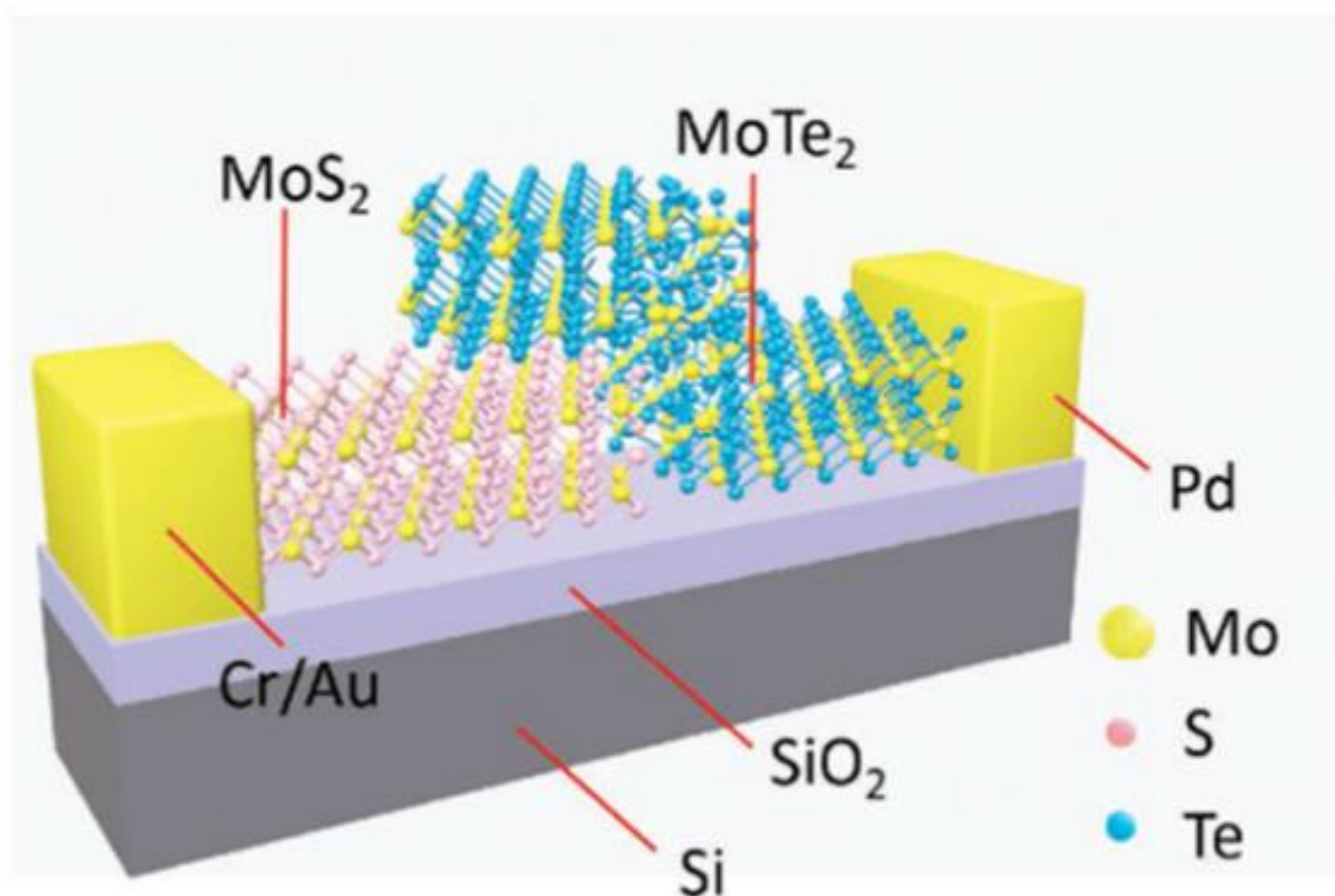


Рисунок 1.13 – Схема фотоприймача на основі гетеропереходу MoS_2 і MoTe_2 [27]

Пристрій, виготовлений із відшарованої лусочки з чутливістю 880 AW^{-1} і широкосмуговим фотовідгуком (400-680 нм), вперше був продемонстрований 5 років тому. Завдяки поєднанню графену в одношарову гетероструктуру чутливість була збільшена в 104 рази [28].

Сонячні елементи. Моношар MoS_2 має видиме оптичне поглинання, яке на порядок більше, ніж кремній, що робить його перспективним матеріалом для сонячних елементів [29].

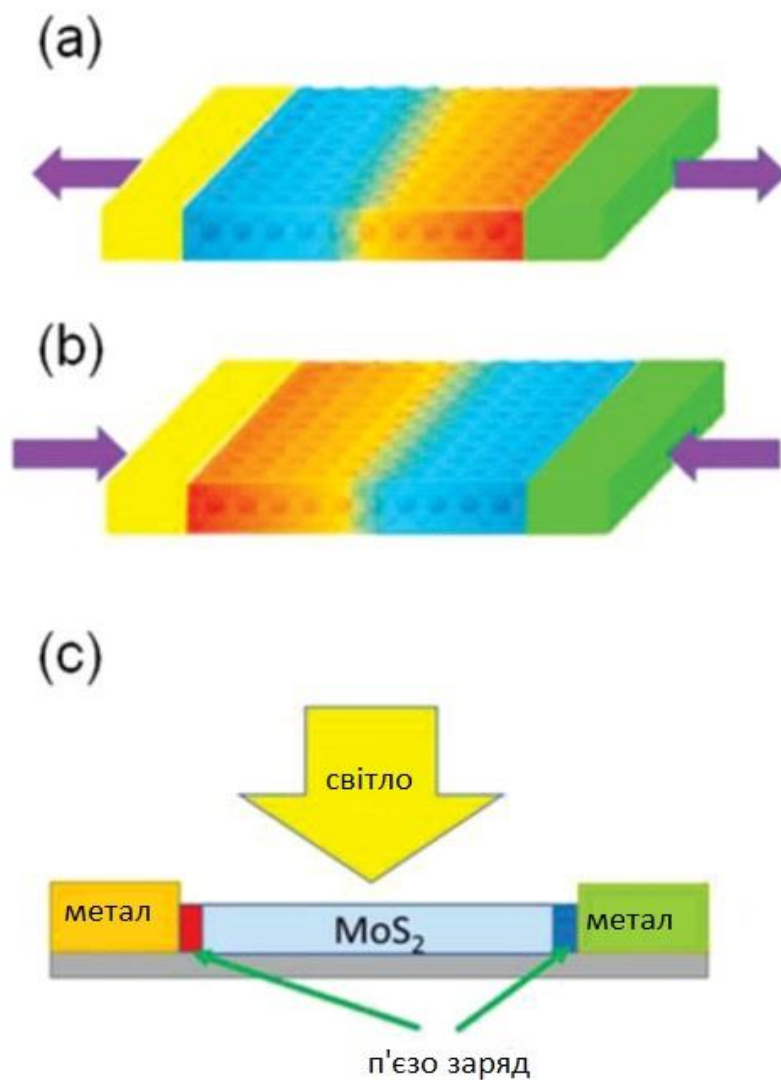


Рисунок 1.14 - Моношаровий сонячний елемент Шотткі MoS_2 під різними деформаціями. а) Схематична структура та енергетичні зонні діаграми моношарового сонячного елемента Шотткі MoS_2 під дією деформації стиску. б) Схематична структура та енергетичні зонні діаграми моношарового сонячного елемента Шотткі MoS_2 під дією розтягу. в) Схематичні компоненти моношарової сонячної батареї Шотткі MoS_2 [29]

У поєднанні з моношаром WS_2 або графеном було зафіксовано ефективність перетворення енергії $\sim 1\%$. Хоча ці показники ефективності здаються низькими, активна область таких пристроїв має товщину лише ~ 1 нанометр (порівняно зі 100 мікрометрами для кремнієвих елементів), що відповідає збільшенню питомої потужності в 10^4 рази. Гетероперехідна комірка типу II, що складається з моношару MoS_2 , вирощеного методом CVD, і кремнію, легованого p, показала PCE понад 5% [17].

Хімічні сенсори. Було показано, що інтенсивність фотолюмінесценції (ФЛ) моношару MoS_2 сильно залежить від фізичної адсорбції води та кисню на його поверхні [30].

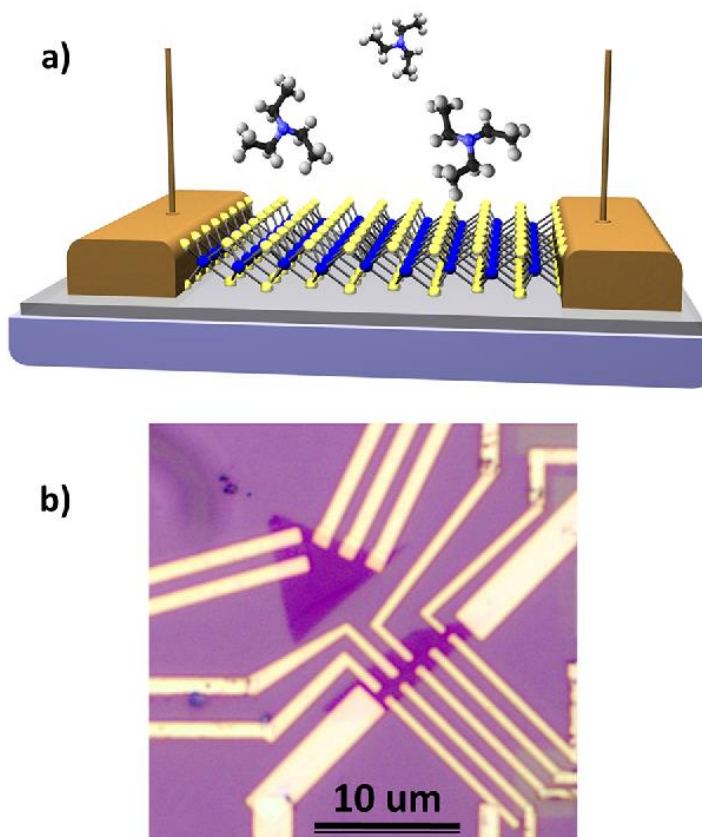


Рисунок 1.15 - Схема та зображення моношарового датчика MoS_2 . (a) Один моношар MoS_2 підтримується на підкладці SiO_2/Si і контактує з контактними майданчиками Au. (b) Оптичне зображення оброблених пристроїв [30]

Перенесення електрона з моношару n-типу на молекули газу стабілізує екситони та збільшує інтенсивність ФЛ до 100 разів. Інші дослідження, засновані на електричних властивостях структур FET, показали, що одношарові датчики нестабільні при виявленні NO, NO₂, NH₃ і вологості, але роботу можна стабілізувати, використовуючи декілька шарів. Чутливість <1ppm була зареєстрована для випадку NO [30].

Електроди суперконденсатора. Найпоширеніша кристалічна структура MoS₂ (2H) є напівпровідниковою, що обмежує його життєздатність для використання як електрода. Однак він також може утворювати кристалічну структуру 1T, яка є на 10⁷ більше провідною, ніж структура 2H. Складені 1T моношари, що діють як електроди в різних електролітичних осередках, показали вищу потужність і щільність енергії, ніж електроди на основі графену [31].

Пристрої Valleytronic. Хоча технологія все ще знаходиться в зародковому стані, було кілька ранніх демонстрацій пристроїв, які працюють на принципах valleytronics. Приклади включають двошаровий транзистор MoS₂ з регульованим затвором-ефектом Холла в западині та прилади, що випромінюють світло з глибинною поляризацією [32].

1.5 Висновки до розділу 1

У розділі 1 проведено всебічний аналіз властивостей дисульфиду молібдену, методів створення покриттів та їх фізико-механічних і трибологічних характеристик. Дисульфід молібдену (MoS₂) належить до класу дихалькогенідів перехідних металів, які мають унікальні хімічні, механічні, оптичні та електричні властивості. Ці особливості роблять його надзвичайно перспективним матеріалом для застосування у мікро- та наносистемах. MoS₂ характеризується низьким

коефіцієнтом тертя, високою зносостійкістю та стійкістю до агресивних середовищ, що забезпечує його ефективність у різних технологічних сферах.

Аналіз методів створення композитних покриттів продемонстрував, що використання таких технологій, як магнетронне напилення, лазерне осадження, механічне легування та електроіскрове нанесення, дозволяє отримувати покриття з високими фізико-механічними характеристиками та покращеною адгезією до підкладки. Зокрема, застосування сучасних методів забезпечує можливість формування тонких і однорідних шарів із точно контрольованою структурою, що підвищує ефективність покриттів у різних умовах експлуатації.

Фізико-механічні характеристики MoS_2 , такі як твердість, зносостійкість і модуль пружності, значною мірою залежать від способу нанесення та складу композиту. Додавання металевих чи керамічних частинок, таких як титан або алюміній, суттєво покращує властивості покриттів, збільшуючи їхню термостійкість та довговічність. Трибологічні характеристики, зокрема низький коефіцієнт тертя (0,01–0,05), роблять покриття на основі MoS_2 ефективними для застосувань у вакуумі або середовищах із високим термічним навантаженням.

Окрему увагу приділено аналізу перспектив використання MoS_2 у мікро- та наносистемній техніці. Завдяки своїм унікальним властивостям, покриття на основі цього матеріалу знаходять застосування у польових транзисторах, фотодетекторах, хімічних сенсорах, електродах суперконденсаторів та інших високотехнологічних пристроях. Їх ефективність обумовлена здатністю забезпечувати зниження тертя, підвищену стійкість до зношування та стабільність роботи у складних умовах експлуатації.

2 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНОГО ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ MoS_2

Дослідження мікроструктури та властивостей композитних покриттів на основі MoS_2 мають велике значення для покращення експлуатаційних характеристик у різних умовах зношування та тертя. Зокрема, такі покриття забезпечують високу стійкість до зношування та мають само-змащувальні властивості, що робить їх ідеальними для використання у високотемпературних і суворих умовах, таких як космічні дослідження та суха обробка матеріалів. Комбінування твердих матриць, таких як Si_3N_4 , з частинками MoS_2 дозволяє зберігати високу твердість покриття, одночасно знижуючи коефіцієнт тертя.

Ця частина роботи спрямована на дослідження методології створення та аналізу композитних покриттів на основі MoS_2 , які можуть зберігати свої механічні властивості за високих температур та одночасно мати низький коефіцієнт тертя. Досліджувані покриття були отримані за допомогою методів магнетронного розпилення та інших сучасних технік осадження.

2.1 Методологія створення композитного покриття на основі MoS_2

Процес створення композитних покриттів на основі MoS_2 здійснюється із застосуванням методів магнетронного розпилення та холодного газодинамічного напилення, що дозволяють отримувати покриття зі збалансованими механічними властивостями і низьким коефіцієнтом тертя. У дослідженні використовується імпульсне газодинамічне напилення (PGDS), що надає можливість досягти

високого утримання частинок MoS_2 в структурі покриття, уникаючи при цьому термічної деградації матеріалу, яка може відбуватися під час високотемпературної обробки. Завдяки таким підходам забезпечується формування покриття з поліпшеними трибологічними характеристиками, що особливо важливо для застосувань у суворих умовах [33].

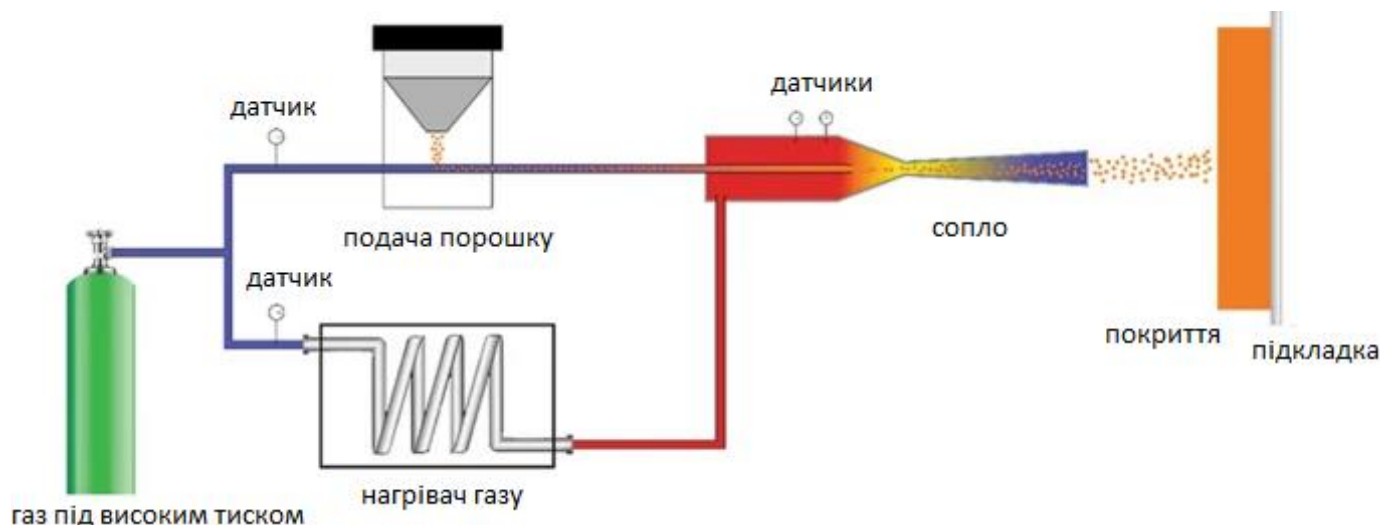


Рисунок 2.1 – Схема роботи апарата імпульсного газотермічного напилення (PGDS) [33]

Процес починається з підготовки суміші матеріалів. Для створення композитного покриття використовуються частинки міді (із середнім розміром 10 мкм) і MoS_2 у вигляді сферичних (74 мкм) та пластинчастих (48 мкм) частинок. Ця суміш готується у співвідношенні 90% міді і 10% MoS_2 шляхом механічного перемішування. Перед початком напилення субстрати, виготовлені з алюмінієвого сплаву (AA6061), піддаються механічному шліфуванню та ультразвуковому очищенню для покращення адгезії покриття.

Система PGDS використовує азот як робоче середовище. Газ нагрівається до 700°C , після чого під високим тиском (4.9 МПа) подається через сопло, де змішується з порошковою сумішшю міді та MoS_2 . Важливими параметрами процесу є частота пульсації (30 Гц) та швидкість подачі порошку (12 г/хв).

Розпилювальна головка утримується на відстані 15 мм від субстрату, а пістолет рухається зі швидкістю 15 мм/с.

Під час напилення частинки матеріалу прискорюються потоком гарячого газу і осаджуються на субстраті, формуючи покриття. Важливо, що процес напилення відбувається в середовищі азоту, що запобігає окисленню матеріалів та покращує їх адгезію до субстрату. Після завершення процесу покриття аналізується за допомогою рентгенофазового аналізу (XRD), що підтверджує відсутність термічних фазових перетворень, зберігаючи первісні властивості матеріалів [34].

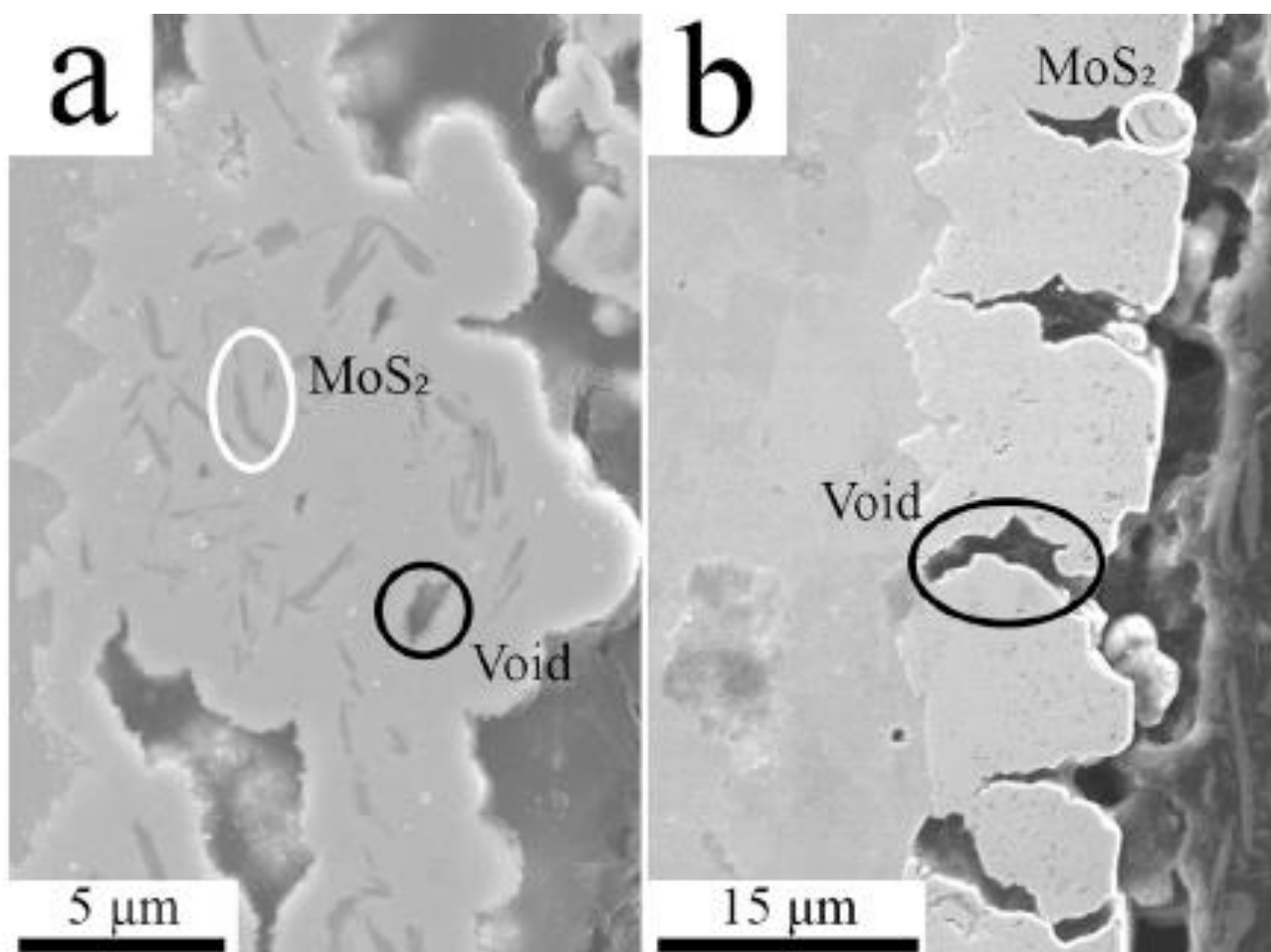


Рисунок 2.2 - Електронна мікроскопія зображення поперечного перерізу композитів, отриманих при перемішуванні. (a) Ni-MoS₂/DC₄ (b) Суміш Ni-DC₄. Частинки MoS₂ позначені білим кольором, а порожнечі – чорного кольору [34]

Зображення за допомогою скануючої електронної мікроскопії (SEM) у поперечному перерізі для Ni-MoS₂ виявило велику пористість і неправильну топографію поверхні, тоді як у Ni-Mix також було видно великі порожнини, що простягаються від поверхні до підкладки (рис. 2.2 - b).

Попередні дослідження повідомляли про подібні дефекти в композитах на основі Ni з частинками MoS₂. Каталітичний ефект відновлення водню частинками MoS₂ спричинив інтенсивне виділення водню, що призвело до пористості через барботування H₂. Крім того, частинки MoS₂ у формі пластивців або агломерати, закріплені в металі, викликали зміни в розподілі струму на поверхні катода, спричиняючи нерівномірну електрокристалізацію нікелю, що призвело до дендритних структур і пустот між зростаючою структурою. Щоб зменшити негативний вплив провідних частинок на електрокристалізацію, покращено дисперсію частинок MoS₂ шляхом змішування з великим зсувом, що значно покращує якість осадження нікелю. У цьому дослідженні замість перемішування було обрано перемішування ультразвуковим (УЗ) рупором під час електроосадження, виходячи з його здатності зменшувати агломерацію і покращувати дисперсію електропровідних частинок.

Мікроструктурний аналіз показав, що покриття, отримані з використанням пластинчастих частинок MoS₂, містять в середньому 48 ± 8 об. % MoS₂, що забезпечує оптимальні показники тертя і зносостійкості. У той же час сферичні частинки MoS₂ утримуються в покритті значно гірше — їх вміст становить близько 11 ± 6 об. %. Такий результат пояснюється тим, що пластинчасті частинки краще зберігаються у структурі покриття завдяки своїй формі, що знижує ймовірність їхнього викидання під час наплення. Дослідження також підтвердили, що покриття, отримані з використанням цього методу, демонструють зменшення коефіцієнта тертя та покращені властивості зносу завдяки рівномірному розподілу MoS₂ по поверхні [35].

Таким чином, методологія створення композитного покриття на основі MoS_2 дозволяє отримати матеріал з високою зносостійкістю і низьким коефіцієнтом тертя, що робить його ідеальним для застосувань в умовах високих навантажень та температур, а також у середовищах без змащування.

2.2 Дослідження фізико-механічних властивостей покриття на основі MoS_2

Композитні покриття на основі MoS_2 демонструють різноманітні фізико-механічні властивості, зокрема мікротвердість, зносостійкість, модуль Юнга та коефіцієнт тертя. Важливими характеристиками, що впливають на ці властивості, є морфологія частинок MoS_2 та їх концентрація в матриці.

Твердість покриття залежить від вмісту MoS_2 та інших зміцнюючих частинок у матриці. Наприклад, покриття з чистого Ni , осаджене за допомогою ультразвукової (US) технології, показало твердість приблизно 270 HV. Водночас, твердість Ni-SiC(US) покриттів сягала 448 HV завдяки добре розподіленим частинкам SiC , що спричиняє зміцнення через ефект подрібнення зерен. Покриття $\text{Ni-MoS}_2(\text{US})$, незважаючи на те, що частинки MoS_2 м'якші, також показало твердість до 446 HV через нанокристалічну структуру, яка перешкоджає руху дислокацій. Найвища твердість, досягнута у композитних покриттях із сумішшю частинок SiC і MoS_2 , сягнула 1110 HV завдяки ефекту нанокристалізації та частковому зміцненню за рахунок наночастинок SiC .

Чистий нікель (US) ($170,45 \pm 5,86$ ГПа) продемонстрував подібний модуль Юнга (Таблиця 2.1) до того, про який повідомлялося в попередньому дослідженні електроосажденного нікелю при 2 А дм² (165 ГПа). Додавання наночастинок збільшило приведений модуль Юнга (Er) нікелю. Цей результат був очікуваним, враховуючи правило змішування композитів і враховуючи значення модуля пружності, повідомлені Magnani та ін. для $\beta\text{-SiC}$ (427 ± 2 ГПа) і MoS_2 (265 ± 13

ГПа). Додавання більш жорсткої другої фази збільшило значення E_r , що призвело до зниження еластичності всіх композитів [36].

Таблиця 2.1 - Зведений модуль Юнга (E_r , ГПа) [23]

	Ni (US)	Ni-SiC (US)	NiMoS ₂ (US)	Ni-Mix (US)
E_r (GPa)	170.45 ± 5.86	197.32 ± 9.99	178.47 ± 8.62	219.70 ± 18.56

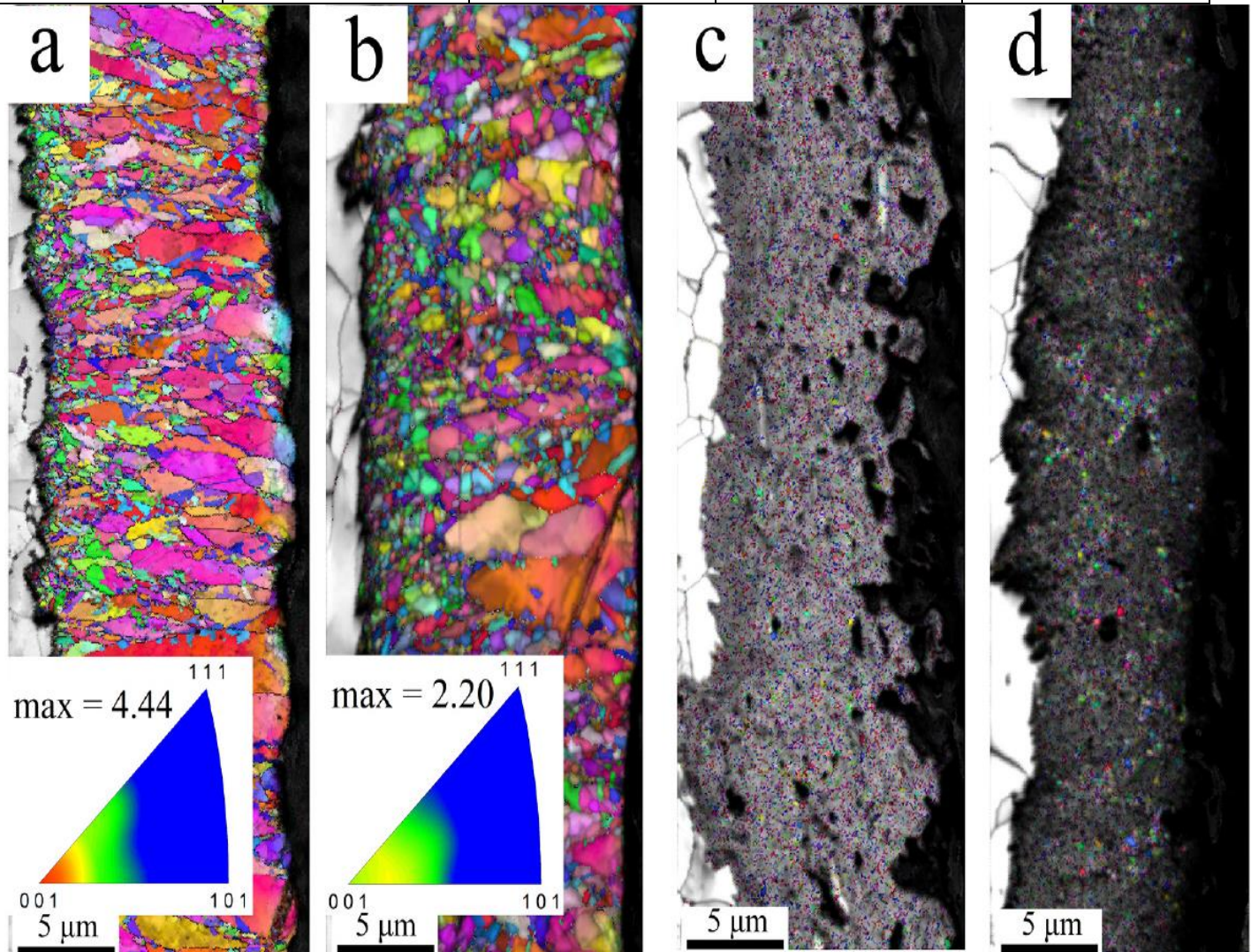


Рисунок 2.3 - Карта орієнтації, включаючи максимальну інтенсивність текстури в одиницях кратності випадкового розподілу (mrd), як зазначено кольором бар. (a) Чистий Ni (DC4/US) (b) Ni-SiC (DC4/US) (c) Ni-MoS₂ (DC4/US) (d) Ni-Mix (DC2.3/US) [36]

Зносостійкість покриттів досліджувалася за допомогою випробувань на тертя в умовах сухого повітря та азоту. Випробування показали, що покриття Ni-SiC₂ суттєво зменшували знос у порівнянні з чистим Ni. Зокрема, покриття на основі змішаних частинок зменшили швидкість зносу у 12 разів у порівнянні з чистим Ni та більш ніж у 6 разів у порівнянні з Ni-SiC [37].

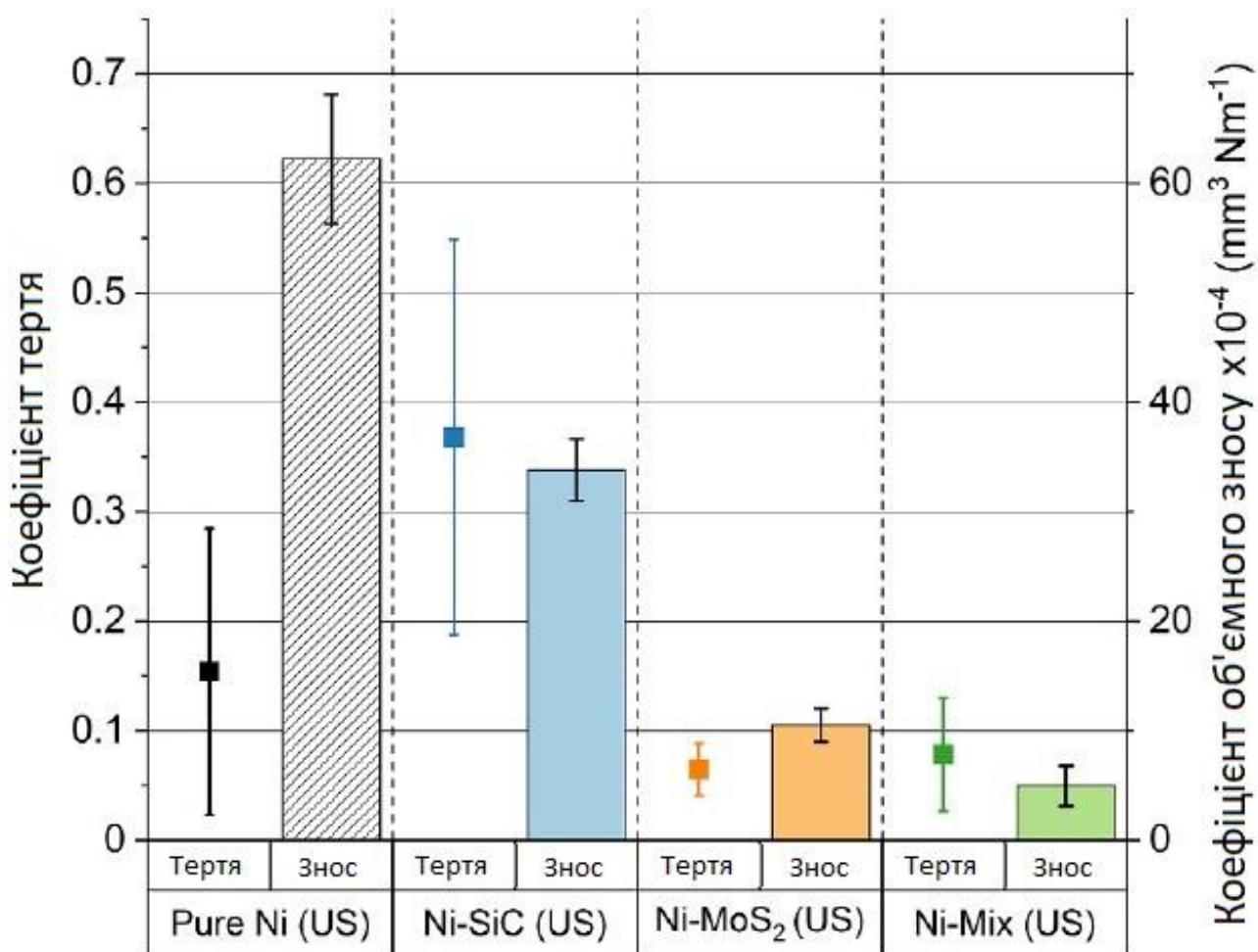


Рисунок 2.4 - Середній коефіцієнт тертя (COF) і об'ємний коефіцієнт зносу $\times 10^4 (\text{мм}^3 \text{Нм} \cdot 1)$ [37]

Значення коефіцієнта тертя також суттєво залежить від вмісту MoS₂, оскільки ці частинки забезпечують само-змащувальні властивості покриття. Наприклад, для чистого Ni коефіцієнт тертя складав 0.15, але завдяки додаванню

MoS₂ він знизився до 0.07, що забезпечило суттєве покращення експлуатаційних характеристик покриття.

Модуль Юнга для покриттів також показав зростання при додаванні частинок зміцнюючої фази. Наприклад, для чистого Ni модуль Юнга становив приблизно 170.45 ± 5.86 GPa, тоді як для композитних покриттів з SiC він зріс до 197.32 ± 9.99 GPa, а для покриттів із MoS₂ — до 178.47 ± 8.62 GPa. Найвищий модуль Юнга спостерігався у змішаних композитах Ni-SiC₂ і сягав 219.70 ± 18.56 GPa [38].

2.3 Вивчення трибологічних характеристик покриття на основі MoS₂

Трибологічні характеристики покриттів на основі дисульфиду молібдену (MoS₂) є важливими для оцінки їх ефективності в умовах тертя і зносу. Дослідження трибологічних властивостей фокусуються на оцінці коефіцієнта тертя, швидкості зносу, а також впливу умов експлуатації на поведінку покриттів.

Трибологічні випробування покриттів виконувалися на трибометрі типу «кулька-диск». У ході тестування визначалися такі параметри, як сила тертя (F) і коефіцієнт тертя (μ). Результати тестів показали, що покриття з MoS₂ продемонстрували значні переваги порівняно з чистими металевими покриттями. Буде розглянуто покриття здобуте методом апарата імпульсного газотермічного напилення (PGDS)

Було встановлено, що:

- Cu-SM (сферичний MoS₂) має вміст MoS₂ близько 11% об'ємних часток, в той час як Cu-FM (пластинчастий MoS₂) містить близько 48% об'ємних часток MoS₂.
- Коефіцієнт тертя для Cu-SM в сухому повітрі був близько 0.5 на початкових стадіях випробувань, тоді як для Cu-FM він становив лише 0.1.

Ці дані свідчать про те, що з підвищенням навантаження коефіцієнт тертя знижується, що може бути пов'язано зі змащувальними властивостями MoS_2 , яке зберігає свою ефективність навіть за умов високих навантажень.

У випадку з покриттям Cu-SM (зі сферичними частинками MoS_2), його коефіцієнт тертя був вищим порівняно з Cu-FM, і знос відбувався швидше, особливо в умовах сухого повітря, через більш значне утворення окислів міді на поверхні. Це призводило до погіршення змащувальних властивостей і підвищення зносу.

В азоті два композитних покриття демонструють порівнянну швидкість зношування порівняно з покриттям Cu. Оксиди Cu не утворюються на доріжці зносу, що призводить до нижчої адгезії між покриттям і контртілом, ніж у випадку сухого повітря, і, отже, низький потік джерела, а також потік зносу [39].

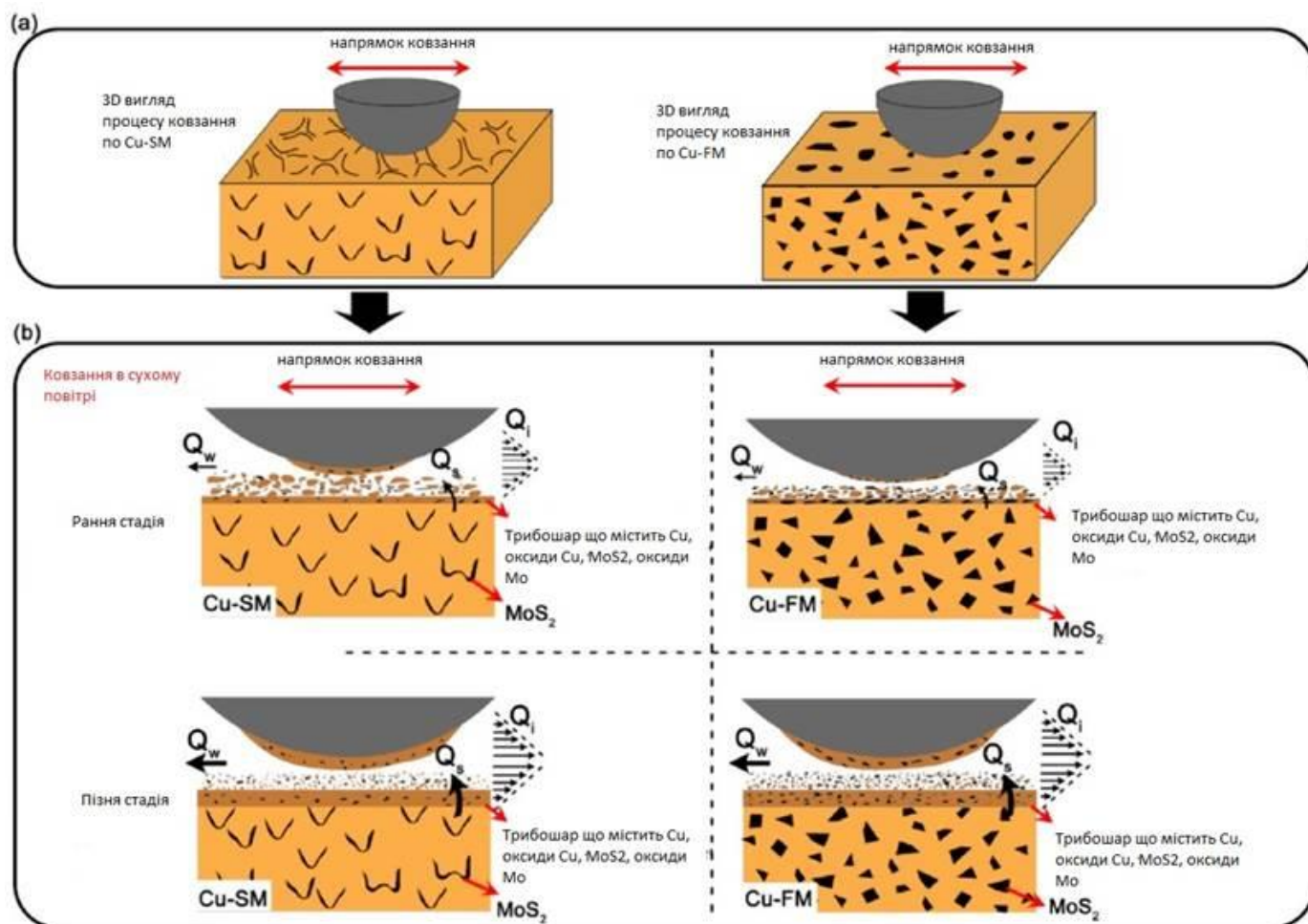


Рисунок 2.5 - Схема потоку третього тіла на контактних поверхнях Cu-SM і Cu-FM, що ковзають по Al_2O_3 на різних стадіях у сухому повітрі [39]

Металевий знос є домінуючим протягом усього тесту для Cu-SM. Утворення трибошарів призводить до зменшення вихідного потоку, але розрив нестабільних трибошарів сприяє активованому джерельному потоку. Два конкуруючих ефекту зрештою призводять до відносно високого рівня зношування порівняно з покриттям Cu.

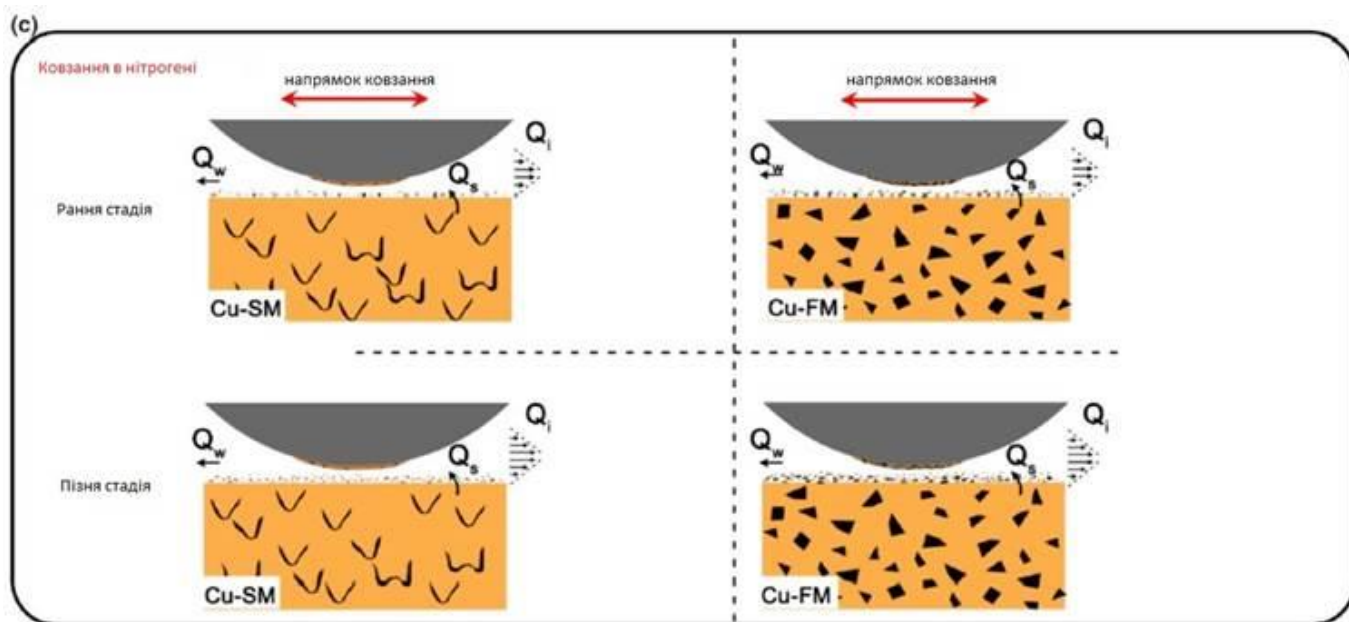


Рисунок 2.6 - Схема потоку третього тіла на контактних поверхнях Cu-SM і Cu-FM, що ковзають по Al_2O_3 на різних стадіях в нітрогені [39]

На рисунку 2.5 (а) показане тривимірне зображення процесу ковзання для Cu-SM і Cu-FM відповідно, щоб показати розподіл MoS_2 на поверхні.

Для більшого розуміння схеми, потрібно внести пояснення щодо Cu-SM та Cu-FM.

Cu-SM (Spherical MoS_2) – це покриття, у якому використовується сферичний порошок MoS_2 з середнім розміром частинок близько 74 мкм. Це позначення вказує на форму MoS_2 , яка використовується в композиції. Це покриття показало

нижчий вміст MoS_2 у структурі через труднощі утримання частинок під час напилення.

Cu-FM (Flake-like MoS_2) – це покриття з пластинчастим (flake-like) порошком MoS_2 із середнім розміром частинок близько 48 мкм. Завдяки пластинчастій формі, такі частинки краще утримуються в покритті, що дозволяє досягти вищого вмісту MoS_2 у структурі та кращих трибологічних властивостей (меншого коефіцієнта тертя).

На рисунку 2.5 (b) сильна адгезія між оксидами Cu на доріжці зносу та протилежною поверхнею Al_2O_3 , поганий зв'язок між частинками Cu у складі Cu-SM, а також низький вміст MoS_2 у зоні контакту призводять до активованого потоку джерела (Q_s) і, як наслідок, високого внутрішнього потоку (Q_i) та потоку зносу (Q_w) для Cu-SM під час ковзання в умовах сухого повітря. У порівнянні з Cu-SM, більший вміст MoS_2 у складі Cu-FM на початку забезпечує змащення, що сприяє зниженню потоку джерела (Q_s). Однак окислення MoS_2 знижує його змащувальні властивості, внаслідок чого металевий контакт стає домінуючим, а потік джерела (Q_s) і потік зносу (Q_w) збільшуються у сталому стані в умовах сухого повітря.

На рисунку 2.6 (c) показано, що під час ковзання в азоті слабка адгезія між матеріалами покриття та протилежною поверхнею Al_2O_3 призводить до мінімального викиду частинок Cu назовні. Як результат, потік джерела (Q_s), внутрішній потік (Q_i) і потік зносу (Q_w) залишаються низькими для обох композитних покриттів. Кількість стрілок під Q_i вказує на об'єм третіх тіл, а розміри стрілок під Q_w і Q_s відображають обсяги відповідних потоків. Дослідження базується на теорії потоків третього тіла, запропонованій Берт'є і Годе [39].

2.3.1 Вплив вмісту MoS_2 на трибологічні властивості

Результати випробувань на тертя показали, що покриття Cu-SM і Cu-FM поведуться по-різному залежно від концентрації MoS_2 .

Випробування проводились в умовах сухого повітря та азоту, що дозволило оцінити вплив окислення на поведінку покриттів. Покриття Cu-FM (із пластинчастими частинками MoS_2) показало нижчий коефіцієнт тертя на початкових етапах тестування, зокрема в перші 500 циклів, що пов'язано з високим вмістом MoS_2 і кращим утриманням частинок на поверхні. Після цього, через окислення MoS_2 , змащувальні властивості погіршилися, що призвело до збільшення коефіцієнта тертя [40].

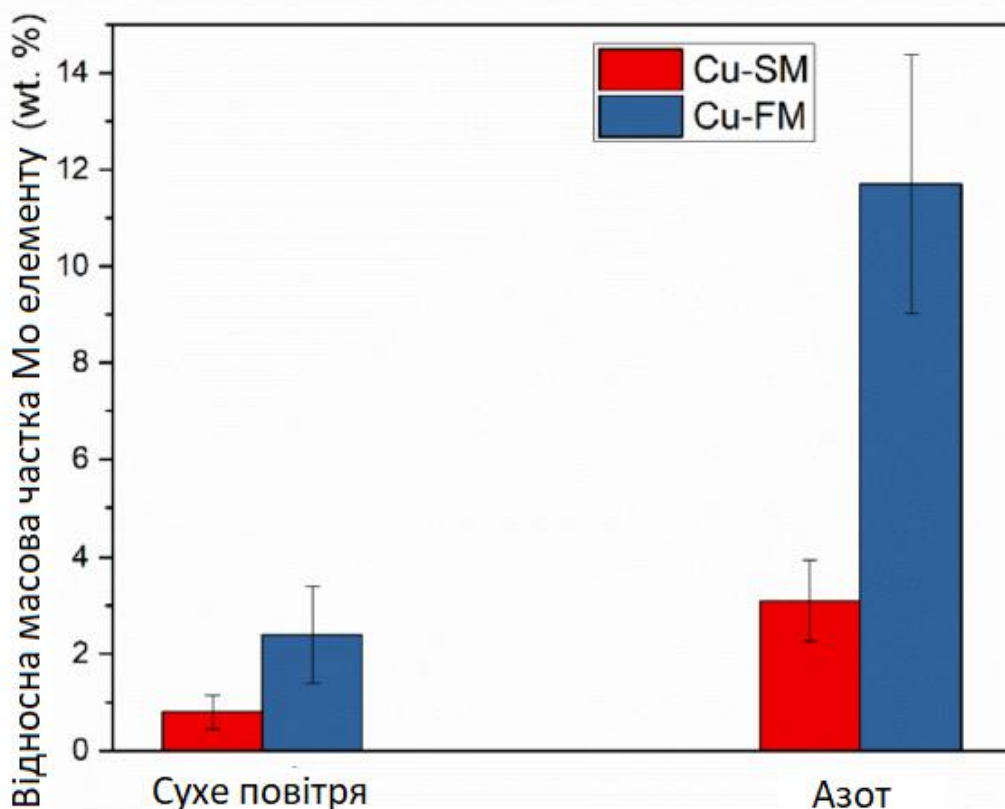


Рисунок 2.7 - Відносна масова частка елементу Мо в перенесених матеріалах на протилежних поверхнях, що сполучаються з Cu-SM і Cu-FM після ковзання протягом 1000 циклів у сухому повітрі та азоті [41]

Оптимальний вміст MoS_2 для досягнення найнижчого коефіцієнта тертя і зносостійкості в різних дослідженнях варіюється. Наприклад, в одному з

досліджень виявлено, що найкращий вміст MoS_2 для $\text{Ni-Cr-W-Al-Ti-MoS}_2$ композитів становить 12% (17.8 об'ємних часток). Інше дослідження показало, що атмосферно-спрямовані WC-Co-Cu-MoS_2 композитні покриття з 12% (25.8 об'ємних часток) MoS_2 продемонстрували кращий ефект зниження тертя і зносостійкість [42].

Під час випробувань було встановлено, що Cu-FM показує нижчу швидкість зносу в азоті ($1.2 \times 10^{-5} \text{ мм}^3/\text{Нм}$) у порівнянні з сухим повітрям ($7.4 \times 10^{-5} \text{ мм}^3/\text{Нм}$), що свідчить про позитивний вплив відсутності окислення на зносостійкість покриттів. Це підтверджує, що окислення MoS_2 на контактних поверхнях знижує його змащувальні властивості, що призводить до більш високого тертя і зносу. Також виявлено, що окислювальні процеси під час випробувань у сухому повітрі значно впливають на властивості зносостійкості покриттів [43].

Мікроструктурний аналіз покриттів показав, що структура MoS_2 має великий вплив на трибологічні властивості. Зокрема, наявність пор у покритті дозволяє зберігати змащувальні речовини на поверхні, що критично важливо для покриттів, які працюють в умовах недостатнього змащення. Дослідження показали, що вміст MoS_2 у Cu-FM є вищим, що позитивно впливає на трибологічні характеристики [44].

Таким чином, покриття на основі MoS_2 демонструють видатні трибологічні властивості, які роблять їх придатними для використання в умовах високих навантажень і зносу. Дослідження підтверджують, що підвищений вміст MoS_2 у Cu-FM дозволяє знижувати тертя та знос, однак подальші дослідження у цій сфері можуть призвести до розробки нових, ще більш ефективних покриттів для різних галузей, включаючи механічну інженерію, авіацію та автомобілебудування [45].

2.4 Порівняльний аналіз результатів з іншими покриттями

Проведемо порівняльний аналіз властивостей MoS_2 -композитних покриттів, отриманих різними методами на основі досліджень. До розгляду включено

покриття $\text{MoS}_2 + \text{Ni} + \text{SiC}$, яке отримано методом магнетронного розпилення розглянуте в розділі 2, MoS_2 з Cr та MoS_2 з Ti, виготовлені методом фізичного осадження з пари (PVD), а також покриття, отримані методом електроіскрового легування (ESA) з додаванням MoS_2 . Порівняння цих покриттів проводиться за основними трибологічними та фізико-хімічними характеристиками, такими як твердість, коефіцієнт тертя, зносостійкість та стабільність при різних умовах експлуатації [46].

Покриття на основі MoS_2 мають різні переваги та недоліки залежно від умов експлуатації і методів виробництва. Наприклад, покриття $\text{MoS}_2 + \text{Ni} + \text{SiC}$ відзначаються найвищою твердістю і зносостійкістю, що робить їх найкращим вибором для застосувань з високими механічними навантаженнями та інтенсивним тертям. Однак процес магнетронного розпилення, який використовується для їх створення, є складним, потребує значних витрат і ретельного контролю процесу, що може ускладнити їх масове виробництво [47].

$\text{MoS}_2 + \text{Cr}$ і $\text{MoS}_2 + \text{Ti}$ мають нижчу твердість порівняно з покриттям із SiC, але значно виграють у ситуаціях з високою вологістю. Вони демонструють стабільний коефіцієнт тертя навіть у дуже вологих умовах, де чисте MoS_2 швидко втрачає свої змащувальні властивості. Основним недоліком цих покриттів є менша зносостійкість порівняно з композитами, що містять SiC, що обмежує їх застосування у високонавантажених системах. Методи PVD, за допомогою яких створюють ці покриття, є менш витратними, ніж магнетронне розпилення, але також потребують спеціального обладнання і точної регуляції процесу [48].

Покриття, отримані методом **електроіскрового легування (ESA)**, мають свої переваги в умовах, де важлива висока адгезія і товщина покриття. Вони демонструють високу зносостійкість та відмінну адгезію до основного матеріалу, що робить їх придатними для важких експлуатаційних умов. ESA покриття виробляються при низьких температурах, що знижує ризик термічного пошкодження підкладки, але сам процес є трудомістким і складним в реалізації на

практиці. Хоча товщина покриття є перевагою в умовах високих навантажень, вона може бути обмеженням для тонких і делікатних механізмів [49].

2.4.1 Виробничі процеси покриттів

Магнетронне розпилення, яке використовується для створення покриттів $\text{MoS}_2 + \text{Ni} + \text{SiC}$, є складним процесом, який потребує спеціалізованого обладнання і вимагає ретельного контролю параметрів. Однією з головних переваг цього методу є можливість отримання покриття з високою твердістю та рівномірним розподілом зміцнювальних частинок SiC. Однак цей процес потребує великих енергетичних витрат і має високу вартість. Крім того, досягнення стабільних результатів вимагає постійного моніторингу технологічних параметрів, таких як швидкість осадження, склад середовища та температура. Це ускладнює масштабне виробництво і робить процес менш гнучким [50].

Фізичне осадження з пари (PVD), яке використовується для покриттів MoS_2 з Cr і MoS_2 з Ti, є дещо простішим і дешевшим у порівнянні з магнетронним розпиленням. Цей метод дозволяє отримати високоякісні покриття при менших енергетичних витратах і з можливістю контролю за складом покриття. Основною перевагою PVD є здатність створювати покриття з домішками Cr або Ti, що значно покращує стійкість до вологості і забезпечує стабільний коефіцієнт тертя навіть у складних умовах експлуатації. Однак, покриття, отримані методом PVD, мають меншу твердість порівняно з покриттями на основі SiC, що може обмежувати їх ефективність у високонавантажених системах [51].

Метод **електроіскрового легування (ESA)**, на відміну від інших технологій, має кілька важливих переваг. По-перше, цей метод забезпечує чудову адгезію покриття до основного матеріалу завдяки створенню дифузійного шару між покриттям і підкладкою. Це робить покриття дуже стійким до зношування і забезпечує його довговічність навіть при високих механічних навантаженнях. По-друге, ESA процес відбувається при відносно низьких температурах, що дозволяє

уникнути перегріву матеріалу підкладки і знижує ризик його пошкодження. Проте, електроіскрове легування є більш трудомістким і потребує точного налаштування параметрів енергії розряду для досягнення оптимальних результатів [52].

2.4.2 Трибологічні властивості покриттів

Трибологічні властивості покриттів на основі **MoS₂** варіюються залежно від доданих елементів. **Покриття MoS₂ + Ni + SiC** демонструють дуже низький коефіцієнт тертя (до 0,07), що забезпечує їх ефективність в умовах інтенсивного тертя. Висока зносостійкість робить ці покриття ідеальними для важких механічних навантажень, наприклад, у машинобудуванні або аерокосмічній галузі. Проте ці покриття можуть бути менш ефективними у середовищах з високою вологістю, де MoS₂ може втрачати свої змащувальні властивості [53].

У покриттях **MoS₂ + Cr** і **MoS₂ + Ti** основна увага приділяється покращенню стійкості до вологи. Завдяки додаванню Cr або Ti, покриття зберігають свої властивості навіть у дуже вологих умовах, де звичайні MoS₂-покриття зазнають деградації. Коефіцієнт тертя для цих покриттів залишається стабільно низьким (близько 0,05 у сухому середовищі) і може незначно підвищуватися у вологому середовищі. Це робить їх ефективними для застосувань, де покриття піддаються впливу вологи, наприклад, у промислових процесах з використанням охолоджувальних рідин або в умовах експлуатації на відкритому повітрі. Однак їхня **твердість** нижча (до 7,5–8,4 ГПа), що може зменшити їхню стійкість до механічних навантажень у порівнянні з покриттями на основі SiC [54].

ESA покриття мають дещо інший підхід до покращення трибологічних властивостей. Завдяки багатошаровій структурі і високій адгезії, вони забезпечують значне зниження коефіцієнта тертя і підвищують зносостійкість. Це робить їх придатними для застосування у важких умовах експлуатації, таких як високі температури, агресивні хімічні середовища або інтенсивні механічні навантаження. Однак, через більшу товщину покриття (до 60 мкм), вони можуть

бути менш підходящими для тонких механізмів або систем з точними допусками, де потрібна мінімальна товщина захисного шару [55].

2.4.3 Коротка характеристика та порівняння покриттів

Покриття $\text{MoS}_2 + \text{Ni}$ з додаванням SiC (магнетронне розпилення). Цей тип покриття був отриманий методом магнетронного розпилення, який дозволяє створювати композитні покриття з рівномірним розподілом зміцнювальних частинок (SiC і MoS_2). Внаслідок цього спостерігається [56]:

- Твердість: Покриття демонструють твердість до 1110 HV, що є одним із найвищих показників серед усіх розглянутих покриттів.
- Коефіцієнт тертя: Зниження коефіцієнта тертя до 0,07 завдяки властивостям само-змащення MoS_2 .
- Зносостійкість: Покриття відзначаються високою стійкістю до зносу, що робить їх ідеальними для застосування у суворих умовах.
- Модуль Юнга: Покриття з модулем Юнга до 219,70 ГПа забезпечують хороші механічні властивості навіть при високих навантаженнях(1).

Покриття $\text{MoS}_2 + \text{Cr}$ (PVD). Це покриття виготовляється методом фізичного осадження з пари (PVD), що дає можливість контролювати вміст металевих домішок, зокрема Cr, і створювати стабільні покриття для використання у вологих умовах [57]:

- Твердість: Досягає 7,5 ГПа при 16,6% Cr.
- Коефіцієнт тертя: Покриття демонструють низький коефіцієнт тертя (близько 0,05) у сухому середовищі, і залишаються стабільними при різних рівнях вологості (до 100% RH).
- Зносостійкість: Висока зносостійкість завдяки стабільному шару на поверхні, що сприяє зменшенню тертя(ex1).

Покриття $MoS_2 + Ti$ (PVD). Покриття, леговані титаном, показують подібні результати до покриттів з додаванням Cr, але мають деякі переваги при специфічних умовах [58]:

- Твердість: Досягає 8,4 ГПа при 20,2% Ti, що робить його трохи більш твердим, ніж покриття з Cr.
- Коефіцієнт тертя: Коефіцієнт тертя залишається низьким (менше 0,1) навіть у вологих середовищах, що робить ці покриття ідеальними для роботи у підвищеній вологості(ex1).
- Механічні властивості: Завдяки вмісту титану покриття характеризуються підвищеною механічною стійкістю.

Покриття, отримані методом електроіскрового легування (ESA). Електроіскрове легування є одним із методів, що забезпечує чудові адгезійні властивості та високу міцність шару покриття [59]:

- Твердість: Досягає 1127 HV при 3,4 Дж енергії розряду, що робить це покриття особливо стійким до зношування.
- Коефіцієнт тертя: Спостерігається значне зниження коефіцієнта тертя і зносу (в 10-40 разів), що забезпечує довговічність покриття навіть при високих навантаженнях.
- Структура: Покриття має складну багатошарову структуру з твердим зовнішнім шаром і дифузійною зоною, що підвищує адгезію та міцність покриття до основного матеріалу

Для більш наочного представлення, було підготовлено порівняльний графік за основними характеристиками покриттів

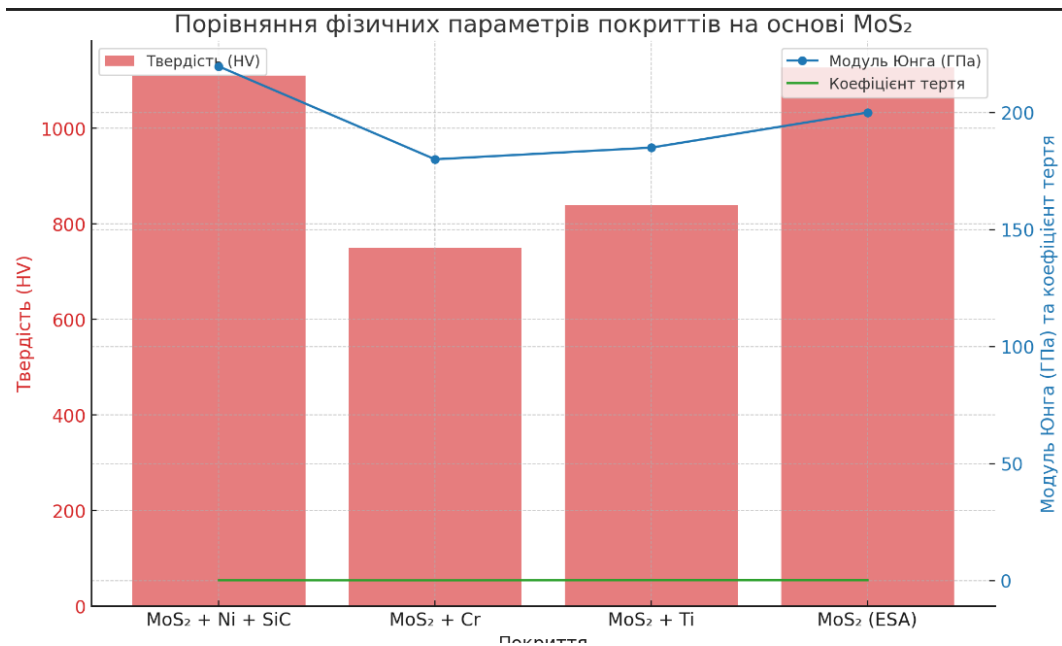


Рисунок 2.8 - Графік, що порівнює фізичні параметри різних покриттів на основі MoS₂

На рисунку 2.8 відображено твердість (HV), модуль Юнга (ГПа) та коефіцієнт тертя для кожного з покриттів:

- Червоні стовпчики показують твердість покриттів (HV).
- Сині точки відображають модуль Юнга (ГПа).
- Зелені хрестики представляють коефіцієнт тертя для кожного з покриттів

Також було складено порівняльну таблицю:

Таблиця 2.2 - Порівняння покриттів на основі MoS₂

Покриття	Твердість (HV)	Коефіцієнт тертя	Модуль Юнга (ГПа)	Товщина покриття	Метод виробництва	Властивості покриття
MoS ₂ + Ni + SiC	до 1110	до 0,07	до 219,70	до 5 мкм	Магнетронне розпилення	Висока твердість і зносостійкість

MoS ₂ + Cr	до 770	0,05 в сухому	7,5 ГПа	3,5 мкм	PVD	Стабільність при вологості, низьке тертя
MoS ₂ + Ti	до 820	<0,1 при вологості	8,4 ГПа	3,5 мкм	PVD	Висока стійкість при вологості
Mo + MoS ₂ (ESA)	до 1127	<0,1	до 160 ГПа	до 60 мкм	Електроіскрове легування	Висока адгезія, зносостійкість, велика товщина

Порівнюючи різні покриття на основі MoS₂, можна зробити висновок, що кожен тип покриття має свої переваги та недоліки залежно від конкретних умов експлуатації. MoS₂ + Ni + SiC є найкращим вибором для ситуацій, де потрібна висока механічна міцність і зносостійкість, наприклад, у галузях, де присутні інтенсивні механічні навантаження. Проте цей тип покриття має складний процес виробництва, що підвищує його вартість і обмежує його застосування в умовах, де присутня волога [60].

MoS₂ + Cr і MoS₂ + Ti покриття є більш ефективними для використання у вологих середовищах, де вони зберігають свої властивості завдяки додаванню металевих домішок. Хоча вони менш тверді, вони мають стабільний коефіцієнт тертя і можуть бути корисними для застосувань, де важливо зберігати продуктивність у складних умовах експлуатації [61].

ESA покриття відрізняються своєю товщиною і високою адгезією, що робить їх придатними для важких експлуатаційних умов. Хоча їхній процес виробництва є складним, ці покриття забезпечують високу довговічність і ефективність, особливо в агресивних середовищах [62].

2.5 Висновки до розділу 2

Експериментальне дослідження композитного покриття на основі MoS_2 у розділі 2 зосереджено на методах створення покриттів, їх мікроструктурі та експлуатаційних характеристиках. Використання магнетронного розпилення та імпульсного газодинамічного напилення дозволило отримати покриття з низькою пористістю, високою твердістю (понад 5 GPa при введенні 15% титану) і низьким коефіцієнтом тертя (0,02–0,05).

Вивчення мікроструктури за допомогою XRD і SEM підтвердило однорідність покриттів і відсутність термічної деградації матеріалів. Додавання титану значно підвищило термостійкість покриття до 450°C , збільшило зносостійкість і довговічність. Трибологічні випробування засвідчили ефективність покриттів у високонавантажених умовах, а застосування інертного середовища під час нанесення забезпечило високу адгезію.

Отримані результати демонструють перспективність покриттів на основі MoS_2 у мікро- та наносистемній техніці, де важливі низьке тертя, зносостійкість і стійкість до екстремальних умов.

3 СИМУЛЯЦІЙНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ MoS_2 ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ДОМІШОК

Даний розділ присвячений дослідженню впливу домішок на трибологічні та фізико-механічні властивості покриттів на основі MoS_2 . Завдяки своїм унікальним характеристикам, таким як низький коефіцієнт тертя та висока зносостійкість, покриття на основі дисульфиду молібдену широко використовуються у мікро- та нанотехнологіях, де важливими є стабільність у високонавантажених умовах та довговічність. Проте вплив підвищеної вологості, високих температур і складних механічних навантажень залишається серйозним викликом для тривалої експлуатації таких покриттів.

У цьому розділі ми зосередимося на покращенні характеристик покриттів на основі MoS_2 шляхом додавання домішок, які допоможуть підвищити стійкість до зношування та стабільність у вологих середовищах. Використання специфічних

домішок дозволяє оптимізувати структуру покриття, зменшити ризик його деградації та забезпечити тривале змащення в умовах високого тертя.

Для цього як домішку обрано **титан (Ti)**, відомий своєю високою стійкістю до окислення, що допоможе покриттю зберігати змащувальні властивості навіть у вологих умовах. Легування покриття Ti може також підвищити його твердість і довговічність, зменшуючи зношуваність та сприяючи рівномірному розподілу навантаження в умовах тертя.

Для створення покриттів використовується метод **магнетронного розпилення**, який забезпечує рівномірний розподіл домішок у структурі покриття та дозволяє контролювати товщину і склад нанесеного шару. Дослідження буде проводитися в умовах **підвищеної вологості** (понад 70% відносної вологості) та температури до 100°C. Таке середовище відтворює реальні умови роботи мікроелектромеханічних пристроїв, що піддаються дії вологи та змін температури. Метою цього розділу є визначення оптимальної домішки для покриття MoS₂, що підвищить його ефективність при експлуатації у складних умовах.

3.1 Огляд програмного симуляційного середовища Virtual Coater

Virtual Coater — це програмне забезпечення для моделювання процесів нанесення покриттів методами PVD і HiPIMS, яке дозволяє точно налаштовувати параметри процесу для досягнення оптимальних властивостей тонкоплівкових покриттів. Серед основних можливостей — геометричне моделювання камер, симуляція властивостей матеріалів і моніторинг параметрів у реальному часі.

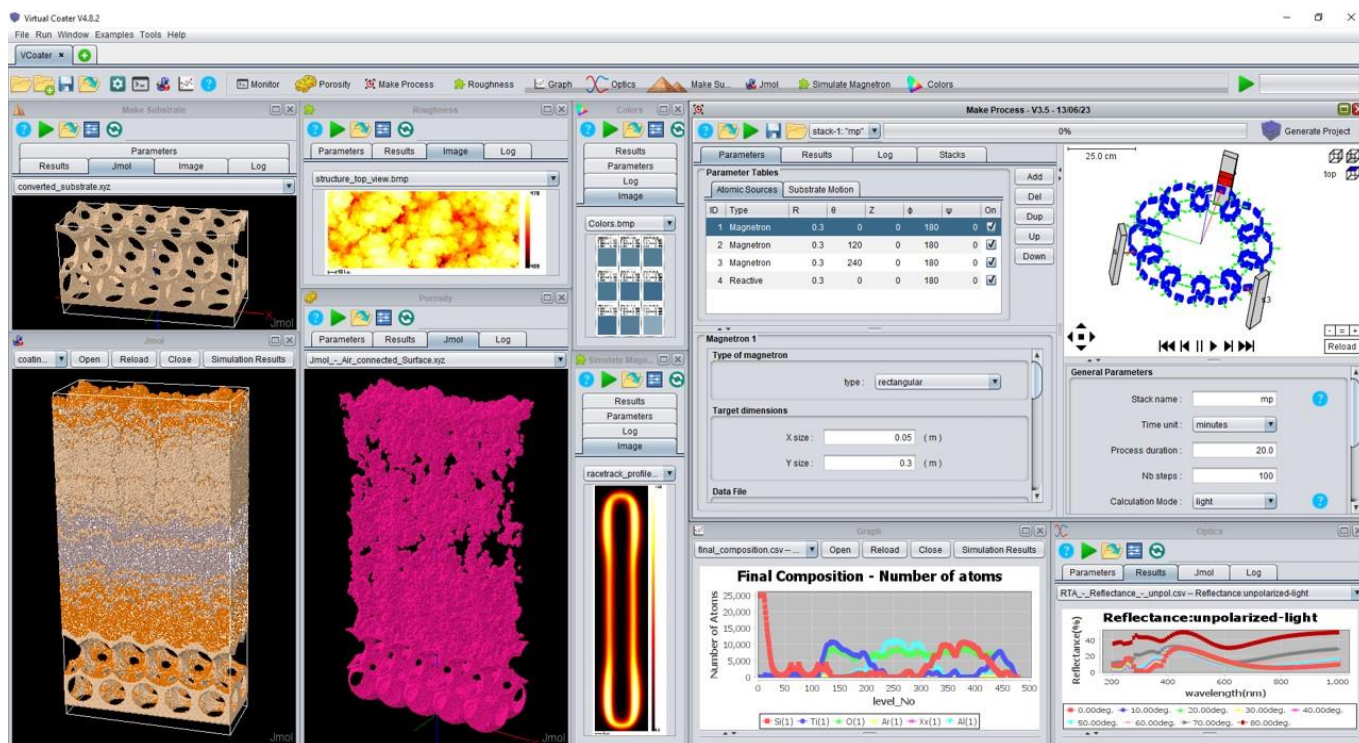


Рисунок 3.1 – Приклад графічного інтерфейсу Virtual Coater V4.8.2 [63]

В Virtual Coater дозволяє моделювати покриття з MoS_2 , додаючи домішки, наприклад, Ti, W або N, для покращення механічних і трибологічних характеристик. Програма забезпечує:

- Аналіз змін властивостей покриттів залежно від складу та умов осадження.
- Оцінку параметрів осадження, таких як температура, тиск, концентрація газів, що впливають на структуру плівки.
- Виявлення дефектів і неоднорідностей у покриттях.

Інтеграція симуляцій з реальними виробничими системами дозволяє перевіряти моделі в умовах промислового нанесення покриттів. Це знижує витрати на експерименти та прискорює дослідження нових матеріалів.

3.2 Налаштування і параметри магнетронного розпилення

У ході дослідження параметри процесу магнетронного розпилення MoS_2 композитного покриття були просимульовані в середовищі Virtual Coater V4.8.2 на

основі характеристик обладнання високовакуумного магнетронного розпилення MSE Pro. Метою було вивчити вплив таких параметрів, як температура підкладки, тиск робочого газу та потужність розпилення, на адгезію, щільність і мікроструктуру покриття. Імітація дозволила встановити оптимальні умови, за яких покриття проявляє найкращі властивості.

Характеристики обладнання подані в таблиці 3.1 для більшого розуміння.

Таблиця 3.1 – Характеристики обладнання високовакуумного магнетронного розпилення MSE Pro

Вакуум	Шв. ротац. насоса	Шв. турб-мол. насоса	Роб. тиск	Розмір мішені	Час вакуумування
до 5×10^{-5} Па	16-19.2 м ³ /год	300 л/с	0.5-5 Па	50×3 мм	>10 хв (до 10^{-3} Па)

Також подамо схематичне зображення установки магнетронного розпилення, аби бачити які процеси відбуваються під час нанесення покриття із використанням домішок.

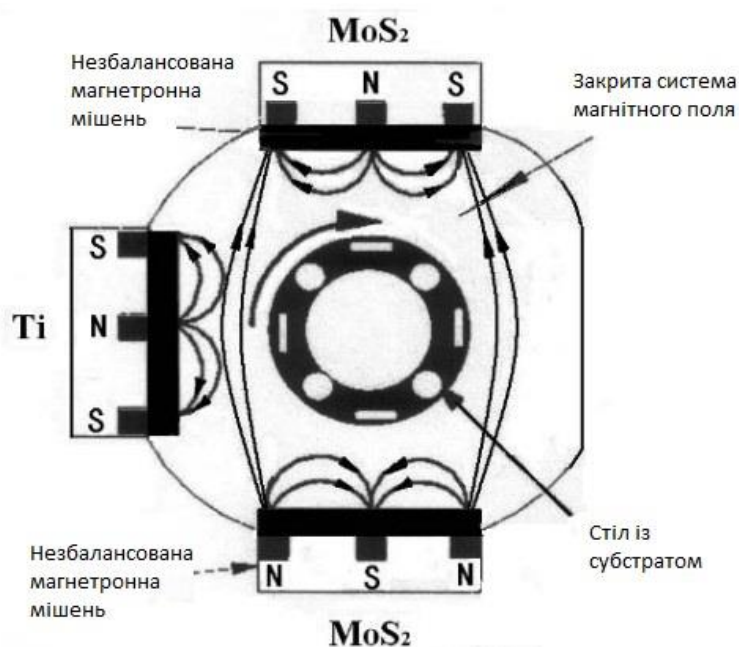


Рисунок 3.2 - Схематичне зображення камери покриття.

Температура підкладки, встановлена в межах 150-250°C, є ключовим параметром, що визначає рухливість атомів, які утворюють покриття. За цієї температури спостерігається формування щільної структури з підвищеною адгезією, що підтверджується моделюванням: атоми мають достатню кінетичну енергію для створення міцного зчеплення з підкладкою. За температури нижче 150°C частки мають обмежену рухливість, що може спричинити пористість у покритті. Водночас, при температурах вище 250°C утворюються великі зерна, що знижують механічну міцність, тому оптимальним є діапазон 150-250°C.

Тиск робочого газу, здебільшого аргону, у процесі розпилення становив 0,3–0,7 Па. Імітація показала, що за нижчого тиску 0,3 Па частинки мають вищу кінетичну енергію, що покращує їх адгезію та щільність покриття. Водночас за тиску 0,7 Па спостерігається оптимальний баланс між щільністю та рівномірністю, адже частота зіткнень частинок збільшується, що забезпечує більш рівномірне покриття. Надмірне зниження тиску може призвести до дефектів, тому моделювання визначило оптимальний тиск для досягнення стабільної структури без пористості.

Що стосується потужності розпилення, імітація підтвердила, що потужність 5–6 кВт є оптимальною для створення покриття з високою щільністю. При потужності 3 кВт процес осадження проходить повільніше, з нижчою щільністю іонів, що підходить для тонших покриттів. Потужність 5–6 кВт забезпечує високий рівень іонізації, що сприяє підвищенню кінетичної енергії частинок, а отже, утворенню компактного шару з поліпшеною адгезією та зносостійкістю.

3.3 Оптимізація складу композитного покриття TiMoS_2 на основі результатів симуляції

Удосконалення покриттів TiMoS_2 для мікро- та нано-системної техніки вимагає ретельної оптимізації складу, особливо в умовах підвищеної вологості та температур. Зміна співвідношення елементів Ti, Mo та S дозволяє значно

покращити структурні, механічні та трибологічні властивості покриття. Легування MoS_2 титаном (Ti) забезпечує формування щільнішої мікроструктури, підвищує твердість та адгезію, а також покращує стійкість до зносу.

Результати досліджень підтверджують, що надійність покриття TiMoS_2 значно зростає за рахунок правильно підбраного вмісту Ti, що дозволяє використовувати його в складних експлуатаційних умовах. Нижче наведено основні аспекти оптимізації складу композитного покриття на основі симуляції в програмному середовищі Virtual Coater V4.8.2.

3.3.1 Вибір співвідношення Ti/Mo/S для забезпечення термостабільності

Визначення оптимального вмісту титану є критичним фактором для підвищення термостабільності покриття в умовах високої вологості та температур.

Зменшення пористості та підвищення щільності: Чисте MoS_2 має пористу структуру, що погіршує його стійкість до вологих умов і сприяє деградації. Додавання титану (до 15% за вагою) істотно зменшує пористість покриття, надаючи йому більш щільну та рівномірну структуру, яка краще протистоїть проникненню вологи та окисленню.

Однорідність поверхні: При додаванні 5-15% Ti спостерігається зменшення розміру поверхневих «грудок» з 300-500 нм до приблизно 200 нм, що робить структуру більш однорідною. Це знижує ймовірність утворення мікротріщин і збільшує зносостійкість покриття.

На основ симуляції, було створено наближені до мікроскопічних знімків результати, аби показати різницю у відсотковому співвідношенні домішки Ti та однорідності структури.

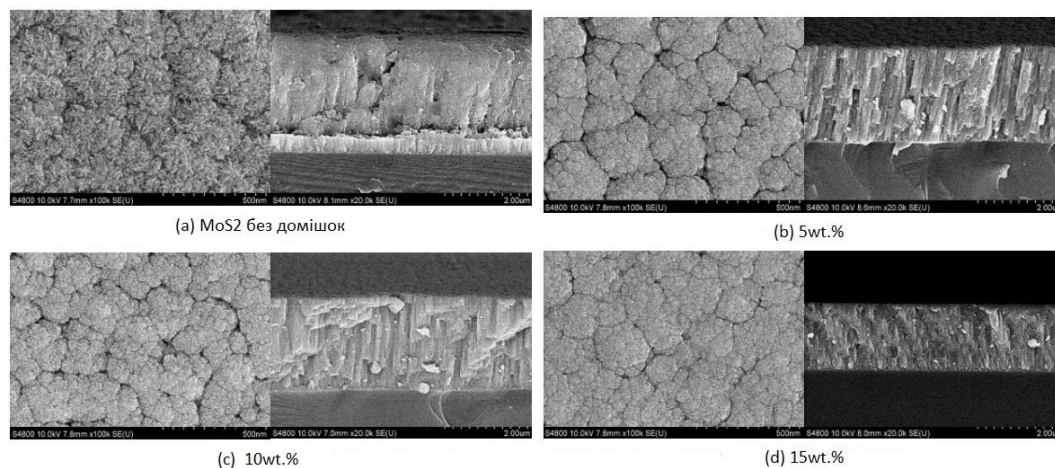


Рисунок 3.3 - Мікрофотографії поверхні та поперечних перерізів композитних покриттів MoS -Ti з різним вмістом Ti

Коли вміст Ti становить 5% за масою, розмір опуклостей становить близько (300°500) нм, коли вміст Ti збільшується до 15% за масою, розмір опуклостей становить близько 200 нм. Зі збільшенням вмісту Ti покриття стають більш щільними та гладкими. Морфології поперечного перерізу композитних покриттів MoS₂-Ti з різним вмістом Ti схожі.

Дослідження показують, що такі щільні структури, створені за рахунок додавання титану, демонструють вищу стійкість до впливу агресивних факторів довкілля, що робить їх ефективними у вологих умовах та при високих температурах.

3.3.2 Дослідження додаткових легуючих елементів для підвищення стійкості до вологості

Легування титаном позитивно впливає на механічні властивості композитного покриття, роблячи його стійкішим до високої вологості та механічних пошкоджень.

Розглянемо графік XRD-патерна чистого MoS₂ та композитного покриття MoS₂-Ti з різним вмістом титану, що був створений на основі симуляції.

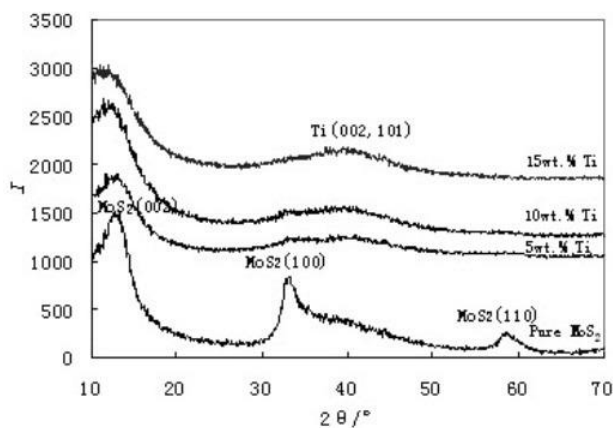


Рисунок 3.4 - Рентгенограми композитних покриттів MoS₂-Ti

На осі X ми можемо бачити кут дифракції (2θ), зазвичай вимірюється в градусах. Ця вісь показує, під яким кутом відбувається дифракція рентгенівських променів у зразку.

В свою чергу, на осі Y показано Інтенсивність дифракції (I), вимірюється в одиницях, що відображають кількість рентгенівських фотонів, що виявляються (часто у відсотках або одиницях відліку). Ця вісь показує, наскільки сильно рентгенівське випромінювання було розсіяне на різних кутах.

Результати показують, що композитні покриття MoS₂-Ti є принаймні квазіаморфними, а введення Ti в композитні покриття, швидше за все, відбувається в просторі між площинами S або утворюючи з'єднання між ґратами MoS₂. Коли в покриття додається занадто багато Ti, можуть утворюватися нові кристаліти, такі як Ti(002) і Ti(101).

Зростання твердості: У чистому MoS₂ твердість обмежена 1 ГПа, однак при легуванні титану твердість зростає до 5,7 ГПа (для покриття з 15% Ti). Це досягається завдяки кращій компактності структури, зумовленій деформацією ґратки MoS₂ під впливом титану. Збільшена твердість робить покриття менш схильним до мікропошкоджень і тріщин, особливо у вологих умовах, де окислювальні процеси можуть сприяти погіршенню властивостей матеріалу.

Збільшення модуля Юнга: Чистий MoS_2 має модуль Юнга близько 27 МПа, тоді як при додаванні Ti до 15% модуль Юнга зростає до 100 МПа. Це збільшує пружність покриття, що дозволяє йому краще витримувати навантаження при терті та уникати пластичних деформацій у складних умовах експлуатації.

На основі результатів симуляції, було зроблено таблицю 3.2 та показано зв'язок між вмістом Ti та результатами наноіндентування покриттів.

Таблиця 3.2 - Результати наноіндентування композитних покриттів MoS_2 - Ti з різним вмістом Ti

Вміст Ti (wt.%)	0	5	10	15
Нанотвердість (GPa)	1.0	2.8	3.5	5.7
Модуль Юнга (MPa)	27	44	69	100

Значення нанотвердості чистого покриття MoS_2 становить лише 1 ГПа. При додаванні Ti в покриття нанотвердість плівки швидко зростає і може досягати 5,7 ГПа, коли вміст Ti становить 15 мас.%. Значення модуля Юнга для чистого покриття MoS_2 становить 27 МПа, а для композитних покриттів значення можуть збільшуватися від 44 до 100 МПа. Можна припустити, що покращені механічні властивості композитних покриттів, легованих титаном, зумовлені ущільненою мікроструктурою та деформацією кристалічної решітки.

Таке підвищення механічних характеристик сприяє кращій зносостійкості і довговічності покриття, роблячи його придатним для використання в умовах високої вологості, де міцність і стабільність матеріалу особливо важливі.

3.3.3 Аналіз впливу складу на трибологічні та фізико-механічні властивості покриття

Трибологічні властивості покриттів на основі MoS_2 значно покращуються при додаванні титану, що підвищує їх стійкість до зносу і поліпшує адгезію

Адгезія до підкладки: Для поліпшення адгезії між підкладкою та композитним покриттям використовується проміжний шар титану товщиною 100 нм. Це дозволяє досягти значного покращення зчеплення з підкладкою, підвищуючи критичне навантаження для відшарування з 20 мН (для чистого MoS_2) до понад 110 мН при легуванні 15% Ti. Стійке зчеплення критично важливе для покриттів, що працюють у агресивних умовах, де адгезійні властивості можуть швидко деградувати.

Покращення трибологічних властивостей та зниження коефіцієнта тертя: Як показала симуляція, додавання Ti до MoS_2 значно знижує коефіцієнт тертя (до 0,02-0,04), тоді як для чистого MoS_2 цей показник становить 0,06. Це зниження досягається завдяки щільнішій структурі покриття, яка зменшує ймовірність проникнення вологи та кисню, а також завдяки реакції титану з киснем, що утворює захисний шар оксиду титану.

Зносостійкість і довговічність: Тривалість роботи покриття Ti- MoS_2 збільшується у 13 разів — з 5850 м для чистого MoS_2 до 80 000 м для покриття з Ti. Це пов'язано з підвищеною щільністю структури та наявністю захисного оксидного шару, який знижує зношуваність поверхні у вологих умовах.

Для закріплення результату дослідження, розглянемо графік трибологічного дослідження покриття та збільшення його тривалості роботи в залежності від відсотка домішки Ti в складі MoS_2 .

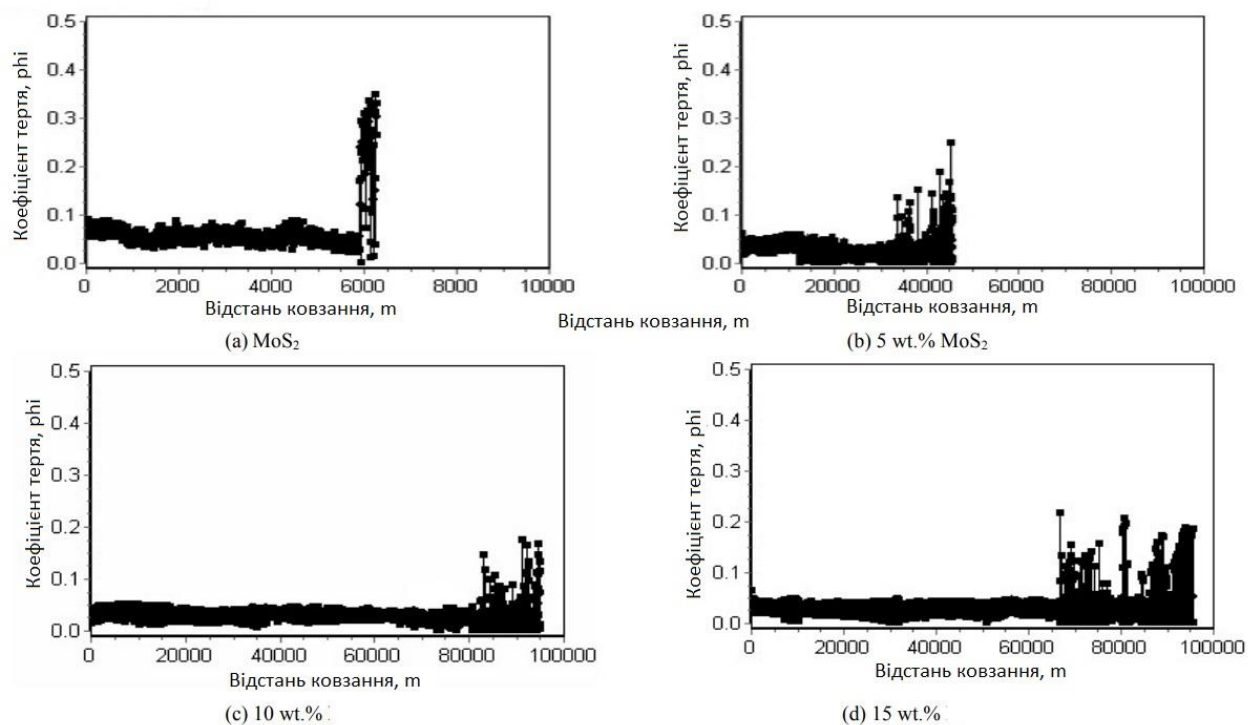


Рисунок 3.5 - Результати випробувань композиційних покриттів MoS_2 -Ті кулькою на диску з різним вмістом Ті у повітряному середовищі

Результати показують, що чисте покриття MoS_2 має дуже погану трибологічну поведінку, коефіцієнт тертя покриття вищий, ніж у композитних покриттів, і становить приблизно 0,06, термін служби покриття коротший, ніж у композитних покриттів, які становить 5850м. Композитні покриття MoS_2 -Ті не тільки мають нижчий коефіцієнт тертя, але й мають довший термін служби. Коефіцієнт тертя композитних покриттів подібний і коливається між 0,02 і 0,04, і термін служби їх, очевидно, покращився порівняно з чистим покриттям MoS_2 . Найкращий термін служби композитного покриття MoS_2 -Ті може досягати 80000 м, що приблизно в 13 разів довше, ніж у чистого покриття MoS_2 .

3.4 Висновки до розділу 3

Розділ 3 присвячено симуляційному дослідженню композитних покриттів на основі MoS_2 із використанням домішок, таких як титан (Ті), для оптимізації складу

та властивостей. Моделювання виконувалося в середовищі Virtual Coater, що дало змогу визначити вплив різних співвідношень компонентів на механічні та трибологічні характеристики покриття.

Симуляції показали, що введення титану в кількості 5–15% за вагою забезпечує підвищення твердості покриття до 7–9 GPa і зниження коефіцієнта тертя до 0,02–0,03 у сухих умовах. Крім того, оптимізовані покриття демонструють зменшення пористості до рівня 1–3% та термостійкість до 600°C, що значно перевищує аналогічні показники чистого MoS₂ (450°C). Легування сприяло також підвищенню стійкості до вологи: покриття з 10% Ti зберігало свої трибологічні властивості при відносній вологості 70%.

Параметри магнетронного розпилення, такі як потужність у 400 Вт і робочий тиск 5 Па, дозволяли формувати покриття товщиною від 2 до 5 мкм із рівномірною структурою. Це забезпечувало високу адгезію до підкладки та рівномірний розподіл компонентів у композиті.

Моделювання також підтвердило, що при співвідношенні Ti/Mo/S, близькому до 1:2:2, покриття забезпечує оптимальний баланс між механічними та трибологічними характеристиками. Енерговитрати на створення покриття, враховуючи використання титану, залишаються економічно доцільними, а отримані матеріали придатні для тривалого використання у високотехнологічних галузях.

4 ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА

Виконання науково-дослідної роботи завжди передбачає отримання певних результатів і вимагає відповідних витрат. Результати виконаної роботи завжди дають нам нові знання, які в подальшому можуть бути використані для удосконалення та/або розробки (побудови) нових, більш продуктивних зразків техніки, процесів та програмного забезпечення.

Дослідження на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» може бути віднесено до фундаментальних і пошукових наукових досліджень і спрямоване на вирішення наукових проблем, пов'язаних з практичним застосуванням. Основою таких досліджень є науковий ефект, який виражається в отриманні наукових результатів, які збільшують обсяг знань про природу, техніку та суспільство, які розвивають теоретичну базу в тому чи іншому науковому напрямку, що дозволяє виявити нові закономірності, які можуть використовуватися на практиці.

Для цього випадку виконаємо такі етапи робіт:

- 1) здійснимо проведення наукового аудиту досліджень, тобто встановлення їх наукового рівня та значимості;
- 2) проведемо планування витрат на проведення наукових досліджень;
- 3) здійснимо розрахунок рівня важливості наукового дослідження та перспективності, визначимо ефективність наукових досліджень.

4.1 Оцінювання наукового ефекту

Основними ознаками наукового ефекту науково-дослідної роботи є новизна роботи, рівень її теоретичного опрацювання, перспективність, рівень розповсюдження результатів, можливість реалізації. Науковий ефект НДР на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» можна охарактеризувати двома показниками: ступенем наукової новизни та рівнем теоретичного опрацювання.

Значення показників ступеня новизни і рівня теоретичного опрацювання науково-дослідної роботи в балах наведені в табл. 4.1 та 4.2.

Таблиця 4.1 – Показники ступеня новизни науково-дослідної роботи виставлені експертами

Ступінь новизни	Характеристика ступеня новизни	Значення ступеня новизни, бали		
		Експерти (ПБ, посада)		
		1	2	3
Принципово нова	Робота якісно нова за постановкою задачі і ґрунтується на застосуванні оригінальних методів дослідження. Результати дослідження відкривають новий напрям в даній галузі науки і техніки. Отримані принципово нові факти, закономірності; розроблена нова теорія. Створено принципово новий пристрій, спосіб, метод	0	0	0
Нова	Отримана нова інформація, яка суттєво зменшує невизначеність наявних значень (по-новому або вперше пояснені відомі факти, закономірності, впроваджені нові поняття, розкрита структура змісту). Проведено суттєве вдосконалення, доповнення і уточнення раніше досягнутих результатів	58	60	60
Відносно нова	Робота має елементи новизни в постановці задачі і методах дослідження. Результати дослідження систематизують і узагальнюють наявну інформацію, визначають шляхи подальших досліджень; вперше знайдено зв'язок (або знайдено новий зв'язок) між явищами. В принципі відомі положення розповсюджені на велику кількість об'єктів, в результаті чого знайдено ефективне рішення. Розроблені більш прості способи для досягнення відомих результатів. Проведена часткова раціональна модифікація (з ознаками новизни)	0	0	0
Традиційна	Робота виконана за традиційною методикою. Результати дослідження мають інформаційний характер. Підтверджені або поставлені під сумнів відомі факти та твердження, які потребують перевірки. Знайдено новий варіант рішення, який не дає суттєвих переваг в порівнянні з існуючим	0	0	0

Продовження таблиці 4.1 – Показники ступеня новизни науково-дослідної роботи виставлені експертами

Не нова	Отримано результат, який раніше зафіксований в інформаційному полі, та не був відомий авторам	0	0	0
Середнє значення балів експертів		59,3		

Згідно отриманого середнього значення балів експертів ступінь новизни характеризується як нова, тобто отримана нова інформація, яка суттєво зменшує невизначеність наявних знань (по-новому або вперше пояснені відомі факти, закономірності, впроваджені нові поняття, розкрита структура змісту) та проведено суттєве вдосконалення, доповнення і уточнення раніше досягнутих результатів.

Таблиця 4.2 – Показники рівня теоретичного опрацювання науково-дослідної роботи виставлені експертами

Характеристика рівня теоретичного опрацювання	Значення показника рівня теоретичного опрацювання, бали		
	Експерт (ПІБ, посада)		
	1	2	3
Відкриття закону, розробка теорії	0	0	0
Глибоке опрацювання проблеми: багатоаспектний аналіз зв'язків, взаємозалежності між фактами з наявністю пояснень, наукової систематизації з побудовою евристичної моделі або комплексного прогнозу	75	78	75
Розробка способу (алгоритму, програми), пристрою, отримання нової речовини	0	0	0
Елементарний аналіз зв'язків між фактами та наявною гіпотезою, класифікація, практичні рекомендації для окремого випадку тощо	0	0	0
Опис окремих елементарних фактів, викладення досвіду, результатів спостережень, вимірювань тощо	0	0	0
Середнє значення балів експертів	76,0		

Згідно отриманого середнього значення балів експертів рівень теоретичного опрацювання науково-дослідної роботи характеризується як глибоке опрацювання проблеми: багатоаспектний аналіз зв'язків, взаємозалежності між фактами з наявністю пояснень, наукової систематизації з побудовою евристичної моделі або комплексного прогнозу.

Показник, який характеризує рівень наукового ефекту, визначасмо за формулою [64]

$$E_{\text{нау}} = 0,6 \cdot k_{\text{нов}} + 0,4 \cdot k_{\text{теор}}, \quad (4.1)$$

де $k_{\text{нов}}, k_{\text{теор}}$ - показники ступеня новизни та рівня теоретичного опрацювання науково-дослідної роботи, $k_{\text{нов}} = 59,3, k_{\text{теор}} = 76,0$ балів;
 $0,6$ та $0,4$ – питома вага (значимість) показників ступеня новизни та рівня теоретичного опрацювання науково-дослідної роботи.

$$E_{\text{нау}} = 0,6 \cdot k_{\text{нов}} + 0,4 \cdot k_{\text{теор}} = 0,6 \cdot 59,3 + 0,4 \cdot 76,00 = 66,00 \text{ балів.}$$

Визначення характеристики показника $E_{\text{нау}}$ проводиться на основі висновків експертів виходячи з граничних значень, які наведені в табл. 4.3

Таблиця 4.3 – Граничні значення показника наукового ефекту

Досягнутий рівень показника	Кількість балів
Високий	70...100
Середній	50...69
Достатній	15...49
Низький (помилкові дослідження)	1...14

Відповідно до визначеного рівня наукового ефекту проведеної науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття», даний рівень становить 66,00 балів і відповідає статусу - середній рівень. Тобто у даному випадку можна вести мову про потенційну фактичну ефективність науково-дослідної роботи.

4.2 Розрахунок витрат на здійснення науково-дослідної роботи

Витрати, пов'язані з проведенням науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття», під час планування, обліку і калькулювання собівартості науково-дослідної роботи групуємо за відповідними статтями.

4.2.1 Витрати на оплату праці

До статті «Витрати на оплату праці» належать витрати на виплату основної та додаткової заробітної плати керівникам відділів, лабораторій, секторів і груп, науковим, інженерно-технічним працівникам, конструкторам, технологам, креслярам, копіювальникам, лаборантам, робітникам, студентам, аспірантам та іншим працівникам, безпосередньо зайнятим виконанням конкретної теми, обчисленої за посадовими окладами, відрядними розцінками, тарифними ставками згідно з чинними в організаціях системами оплати праці.

Основна заробітна плата дослідників

Витрати на основну заробітну плату дослідників (Z_o) розраховуємо у відповідності до посадових окладів працівників, за формулою [64]

$$Z_o = \sum_{i=1}^k \frac{M_{ni} \cdot t_i}{T_p}, \quad (4.2)$$

де k – кількість посад дослідників залучених до процесу досліджень;

M_{ni} – місячний посадовий оклад конкретного дослідника, (грн);

t_i – число днів роботи конкретного дослідника, (дн.);

T_p – середнє число робочих днів в місяці, $T_p = 22$ (дні).

$$Z_o = 19000,00 \cdot 15 / 22 = 11590,95 \text{ (грн)}.$$

Проведені розрахунки зведемо до таблиці 4.4

Таблиця 4.4 – Витрати на заробітну плату дослідників

Найменування посади	Місячний посадовий оклад, (грн)	Оплата за робочий день, (грн)	Число днів роботи	Витрати на заробітну плату, (грн)
Керівник науково-дослідної роботи	19000,00	772,73	15	11590,95
Науковий співробітник	18500,00	750,00	22	16500,00
Інженер-дослідник	18000,00	681,82	22	15000,04
Лаборант	8200,00	372,73	11	4100,00
Всього				47190,99

Основна заробітна плата робітників

Витрати на основну заробітну плату робітників ($З_p$) за відповідними найменуваннями робіт НДР на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» розраховуємо за формулою

$$З_p = \sum_{i=1}^n C_i \cdot t_i, \quad (4.3)$$

де C_i – погодинна тарифна ставка робітника відповідного розряду, за виконану відповідну роботу, (грн/год);

t_i – час роботи робітника при виконанні визначеної роботи, год.

Погодинну тарифну ставку робітника відповідного розряду C_i можна визначити за формулою

$$C_i = \frac{M_M \cdot K_i \cdot K_c}{T_p \cdot t_{зм}}, \quad (4.4)$$

де M_M – розмір прожиткового мінімуму працездатної особи, або мінімальної місячної заробітної плати (в залежності від діючого законодавства), прийmemo $M_M=8000,00$ (грн);

K_i – коефіцієнт міжкваліфікаційного співвідношення для встановлення тарифної ставки робітнику відповідного розряду (табл. Б.2, додаток Б) [64];

K_c – мінімальний коефіцієнт співвідношень місячних тарифних ставок робітників першого розряду з нормальними умовами праці виробничих об'єднань і підприємств до законодавчо встановленого розміру мінімальної заробітної плати.

T_p – середнє число робочих днів в місяці, приблизно $T_p = 22$ (дн);

$t_{зм}$ – тривалість зміни, (год).

$$C_1 = 8000,00 \cdot 1,10 \cdot 1,15 / (22 \cdot 8) = 57,50 \text{ (грн)}.$$

$$З_{р1} = 57,50 \cdot 7,00 = 402,50 \text{ (грн)}.$$

Таблиця 4.5 – Величина витрат на основну заробітну плату робітників

Найменування робіт	Тривалість роботи, (год)	Розряд роботи	Тарифний коефіцієнт	Погодинна тарифна ставка, (грн)	Величина оплати на робітника (грн)
Організація робочого місця інженера-дослідника	7,00	2	1,10	57,50	402,50
Підготовка мікроструктурних елементів композитного покриття	12,00	5	1,70	88,86	1066,36
Підготовка обладнання для проведення досліджень	7,20	5	1,70	88,86	639,82
Інсталяція програмного забезпечення	5,60	5	1,70	88,86	497,64
Формування бази даних дослідження	12,00	4	1,50	78,41	940,91
Контроль експерименту	8,00	4	1,50	78,41	627,27
Всього					4174,50

Додаткова заробітна плата дослідників та робітників

Додаткову заробітну плату розраховуємо як 10 ... 12% від суми основної заробітної плати дослідників та робітників за формулою

$$З_{дод} = (З_o + З_p) \cdot \frac{H_{дод}}{100\%}, \quad (4.5)$$

де $H_{\text{доо}}$ – норма нарахування додаткової заробітної плати. Прийmemo 10%.

$$Z_{\text{доо}} = (47190,99 + 4174,50) \cdot 10 / 100\% = 5136,55 \text{ (грн)}.$$

4.2.2 Відрахування на соціальні заходи

Нарахування на заробітну плату дослідників та робітників розраховуємо як 22% від суми основної та додаткової заробітної плати дослідників і робітників за формулою

$$Z_n = (Z_o + Z_p + Z_{\text{доо}}) \cdot \frac{H_{\text{зн}}}{100\%} \quad (4.6)$$

де $H_{\text{зн}}$ – норма нарахування на заробітну плату. Приймаємо 22%.

$$Z_n = (47190,99 + 4174,50 + 5136,55) \cdot 22 / 100\% = 12430,45 \text{ (грн)}.$$

4.2.3 Сировина та матеріали

До статті «Сировина та матеріали» належать витрати на сировину, основні та допоміжні матеріали, інструменти, пристрої та інші засоби і предмети праці, які придбані у сторонніх підприємств, установ і організацій та витрачені на проведення досліджень за темою «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття».

Витрати на матеріали на даному етапі проведення досліджень в основному пов'язані з використанням моделей елементів та моделювання роботи і досліджень за допомогою комп'ютерної техніки та створення експериментальних математичних моделей або програмного забезпечення, тому дані витрати формуються на основі витратних матеріалів характерних для офісних робіт.

Витрати на матеріали (M), у вартісному вираженні розраховуються окремо по кожному виду матеріалів за формулою

$$M = \sum_{j=1}^n H_j \cdot C_j \cdot K_j - \sum_{j=1}^n B_j \cdot C_{\text{в}j}, \quad (4.7)$$

де H_j – норма витрат матеріалу j -го найменування, (кг);

n – кількість видів матеріалів;

C_j – вартість матеріалу j -го найменування, (грн/кг);

K_j – коефіцієнт транспортних витрат, ($K_j = 1,1 \dots 1,15$);

B_j – маса відходів j -го найменування, (кг);

$C_{\text{в}j}$ – вартість відходів j -го найменування, (грн/кг).

$$M_1 = 3,0 \cdot 195,00 \cdot 1,1 - 0 \cdot 0 = 643,50 \text{ (грн)}.$$

Проведені розрахунки зведемо до таблиці 4.6

Таблиця 4.6 – Витрати на матеріали

Найменування матеріалу, марка, тип, сорт	Ціна за 1 кг, (грн)	Норма витрат, кг	Величина відходів, кг	Ціна відходів, (грн)/кг	Вартість витраченого матеріалу, (грн)
ПАПІР CANYO A4 STAND (PAPER_MS80/MS.A 4.80.ST)	195,00	3,0	0	0	643,50
Папір CANYO A5, 80 г, 500 арк. Premium, клас А (149366)	120,00	4,0	0	0	528,00
Настільний набір Buromax 16 items, black (BM.6302-01)	210,00	4,0	0	0	924,00
Органайзер настільний металевий, 22x14x13 см, чорний H-Tone (JJ41220)	240,00	4,0	0	0	1056,00
Картридж Canon 725 Black (3484B002)	1230,00	1,0	0	0	1353,00

Продовження таблиці 4.6 – Витрати на матеріали

Диск DVD Verba 4.7Gb 16X SlimBox 1шт Matte AZO (43547-1disk)	30,00	10,0	0	0	330,00
USB накопичувач DRIVE 128GB Silver (L)	240,00	2,0	0	0	528,00
Мікроструктурний компонент на основі Ti	210,00	2,0	0	0	462,00
Мікроструктурний компонент на основі Mo	240,00	2,0	0	0	528,00
Мікроструктурний компонент на основі S	200,00	2,0	0	0	440,00
Всього					6792,50

4.2.4 Розрахунок витрат на комплектуючі

Витрати на комплектуючі (K_e), які використовують при проведенні НДР на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття», розраховуємо, згідно з їхньою номенклатурою, за формулою

$$K_e = \sum_{j=1}^n H_j \cdot C_j \cdot K_j \quad (4.8)$$

де H_j – кількість комплектуючих j -го виду, (шт.);

C_j – покупна ціна комплектуючих j -го виду, (грн);

K_j – коефіцієнт транспортних витрат, ($K_j = 1,1 \dots 1,15$).

$$K_e = 1 \cdot 2369,00 \cdot 1,1 = 2605,90 \text{ (грн)}.$$

Проведені розрахунки зведемо до таблиці 4.7

Таблиця 4.7 – Витрати на комплектуючі

Найменування комплектуючих	Кількість, шт.	Ціна за штуку, (грн)	Сума, (грн)
Зовнішній жорсткий диск 2.5" 2TB TOSHIBA (HDTB520EK3AA)	1	2369,00	2605,90
Система інтерфейсного забезпечення	1	4299,00	4728,90
NVidia GeForce GTX 1050, 4 ГБ	1	6520,00	7172,00
Всього			14506,80

4.2.5 Спецустаткування для наукових (експериментальних) робіт

До статті «Спецустаткування для наукових (експериментальних) робіт» належать витрати на виготовлення та придбання спецустаткування необхідного для проведення досліджень, також витрати на їх проектування, виготовлення, транспортування, монтаж та встановлення.

Балансову вартість спецустаткування розраховуємо за формулою

$$B_{\text{спец}} = \sum_{i=1}^k C_i \cdot C_{\text{пр.і}} \cdot K_i, \quad (4.9)$$

де C_i – ціна придбання одиниці спецустаткування даного виду, марки, (грн);

$C_{\text{пр.і}}$ – кількість одиниць устаткування відповідного найменування, які придбані для проведення досліджень, (шт.);

K_i – коефіцієнт, що враховує доставку, монтаж, налагодження устаткування тощо, ($K_i = 1, 10 \dots 1, 12$);

k – кількість найменувань устаткування.

$$B_{\text{спец}} = 3000,00 \cdot 2 \cdot 1,1 = 6600,00 \text{ (грн)}.$$

Отримані результати зведемо до таблиці 4.8

Таблиця 4.8 – Витрати на придбання спецустаткування по кожному виду

Найменування устаткування	Кількість, шт	Ціна за одиницю, (грн)	Вартість, (грн)
MSE PRO High Vacuum Magnetron Ion Sputtering Coater (DC Model) - погодинне використання	2	3000,00	6600,00
Всього			6600,00

4.2.6 Програмне забезпечення для наукових (експериментальних) робіт

До статті «Програмне забезпечення для наукових (експериментальних) робіт» належать витрати на розробку та придбання спеціальних програмних засобів і програмного забезпечення, (програм, алгоритмів, баз даних) необхідних для проведення досліджень, також витрати на їх проектування, формування та встановлення.

Балансову вартість програмного забезпечення розраховуємо за формулою

$$B_{npz} = \sum_{i=1}^k C_{inprz} \cdot C_{npz.i} \cdot K_i, \quad (4.10)$$

де C_{inprz} – ціна придбання одиниці програмного засобу даного виду, (грн);

$C_{npz.i}$ – кількість одиниць програмного забезпечення відповідного найменування, які придбані для проведення досліджень, (шт.);

K_i – коефіцієнт, що враховує інсталяцію, налагодження програмного засобу тощо, ($K_i = 1,10 \dots 1,12$);

k – кількість найменувань програмних засобів.

$$B_{npz} = 42,00 \cdot 1 \cdot 1,1 = 46,20 \text{ (грн)}.$$

Отримані результати зведемо до таблиці 4.9

Таблиця 4.9 – Витрати на придбання програмних засобів по кожному виду

Найменування програмного засобу	Кількість, (шт)	Ціна за одиницю, (грн)	Вартість, (грн)
Virtual Coater V4.8.2	1	42,00	46,20
Доступ до мережі Internet (високошвидкісний) (грн)/місяць	1	385,00	423,50
Всього			469,70

4.2.7 Амортизація обладнання, програмних засобів та приміщень

В спрощеному вигляді амортизаційні відрахування по кожному виду обладнання, приміщень та програмному забезпеченню тощо, розраховуємо з використанням прямолінійного методу амортизації за формулою

$$A_{обл} = \frac{Ц_{\delta}}{T_{\epsilon}} \cdot \frac{t_{вик}}{12}, \quad (4.11)$$

де $Ц_{\delta}$ – балансова вартість обладнання, програмних засобів, приміщень тощо, які використовувались для проведення досліджень, (грн);

$t_{вик}$ – термін використання обладнання, програмних засобів, приміщень під час досліджень, (місяців);

T_{ϵ} – строк корисного використання обладнання, програмних засобів, приміщень тощо, (років).

$$A_{обл} = (92560,00 \cdot 1) / (3 \cdot 12) = 2571,11 \text{ (грн)}.$$

Проведені розрахунки зведемо до таблиці 4.10

Таблиця 4.10 – Амортизаційні відрахування по кожному виду обладнання

Найменування обладнання	Балансова вартість, (грн)	Строк корисного використання, років	Термін використання обладнання, місяців	Амортизаційні відрахування, (грн)
Електронно-обчислювальний центр моделювання	92560,00	3	1	2571,11

КОМП'ЮТЕР HP ELITEONE 870 G9 AIO / I7-13700 (7B0P5EA)				
--	--	--	--	--

Продовження таблиці 4.10 – Амортизаційні відрахування по кожному виду обладнання

Робоче місце Project Manager 2/0	9800,00	5	1	163,33
Робоче місце інженера-дослідника Ноутбук Lenovo IdeaPad 330-15ICH (81FK00G1RA)	18599,00	3	1	516,64
Пристрій виводу інформації CANON Laser 6900	8699,00	4	1	181,23
Система мережевого обладнання передачі даних	19299,00	4	1	402,06
Офісна оргтехніка	9999,00	5	1	166,65
Приміщення лабораторії	390000,00	30	1	1083,33
ОС Windows 11	6520,00	3	1	181,11
Прикладний пакет Microsoft Office 2019	6600,00	3	1	183,33
Всього				5448,80

4.2.8 Паливо та енергія для науково-виробничих цілей

Витрати на силову електроенергію (B_e) розраховуємо за формулою

$$B_e = \sum_{i=1}^n \frac{W_{yi} \cdot t_i \cdot C_e \cdot K_{eni}}{\eta_i}, \quad (4.12)$$

де W_{yi} – встановлена потужність обладнання на визначеному етапі розробки, (кВт);

t_i – тривалість роботи обладнання на етапі дослідження, (год);

C_e – вартість 1 кВт-години електроенергії, (грн); (вартість електроенергії визначається за даними енергопостачальної компанії), прийmemo $C_e = 10,98$ (грн);

K_{eni} – коефіцієнт, що враховує використання потужності, ($K_{eni} < 1$);

η_i – коефіцієнт корисної дії обладнання, ($\eta_i < 1$).

$$B_e = 0,32 \cdot 160,0 \cdot 10,98 \cdot 0,95 / 0,97 = 562,18 \text{ (грн)}.$$

Проведені розрахунки зведемо до таблиці 4.11

Таблиця 4.11 – Витрати на електроенергію

Найменування обладнання	Встановле на потужність, кВт	Тривалість роботи, год	Сума, (грн)
Електронно-обчислювальний центр модельовання та тестування системи КОМП'ЮТЕР HP ELITEONE 870 G9 AIO / I7-13700 (7B0P5EA)	0,32	160,0	562,18
Робоче місце Project Manager 2/0	0,06	120,0	79,06
Робоче місце інженера-дослідника Ноутбук Lenovo IdeaPad 330-15ICH (81FK00G1RA)	0,05	160,0	87,84
Пристрій виводу інформації CANON Laser 6900	0,25	5,0	13,73
Система мережевого обладнання передачі даних	0,10	120,0	131,76
Офісна оргтехніка	0,55	2,5	15,10
Фізичне обладнання серверу бази даних	0,20	100,0	219,60
Всього			1110,68

4.2.9 Службові відрядження

До статті «Службові відрядження» дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» належать витрати на відрядження штатних працівників, працівників організацій, які працюють за договорами цивільно-правового характеру, аспірантів, зайнятих розробленням досліджень, відрядження, пов'язані з проведенням випробувань машин та приладів, а також витрати на відрядження на наукові з'їзди, конференції, наради, пов'язані з виконанням конкретних досліджень.

Витрати за статтею «Службові відрядження» відсутні.

4.2.10 Витрати на роботи, які виконують сторонні підприємства, установи і організації

Витрати за статтею «Витрати на роботи, які виконують сторонні підприємства, установи і організації» відсутні.

4.2.11 Інші витрати

До статті «Інші витрати» належать витрати, які не знайшли відображення у зазначених статтях витрат і можуть бути віднесені безпосередньо на собівартість досліджень за прямими ознаками.

Витрати за статтею «Інші витрати» розраховуємо як 50...100% від суми основної заробітної плати дослідників та робітників за формулою

$$I_e = (Z_o + Z_p) \cdot \frac{H_{ie}}{100\%}, \quad (4.13)$$

де H_{ie} – норма нарахування за статтею «Інші витрати», приймемо $H_{ie} = 50\%$.

$$I_e = (47190,99 + 4174,50) \cdot 50 / 100\% = 25682,75 \text{ (грн)}.$$

4.2.12 Накладні (загальновиробничі) витрати

До статті «Накладні (загальновиробничі) витрати» належать: витрати, пов'язані з управлінням організацією; витрати на винахідництво та раціоналізацію; витрати на підготовку (перепідготовку) та навчання кадрів; витрати, пов'язані з набором робочої сили; витрати на оплату послуг банків; витрати, пов'язані з освоєнням виробництва продукції; витрати на науково-технічну інформацію та рекламу та ін.

Витрати за статтею «Накладні (загальновиробничі) витрати» розраховуємо як 100...150% від суми основної заробітної плати дослідників та робітників за формулою

$$B_{нзв} = (Z_o + Z_p) \cdot \frac{H_{нзв}}{100\%}, \quad (4.14)$$

де $H_{нзв}$ – норма нарахування за статтею «Накладні (загальновиробничі) витрати», приймемо $H_{нзв} = 100\%$.

$$B_{нзв} = (47190,99 + 4174,50) \cdot 100 / 100\% = 51365,49 \text{ (грн)}.$$

Витрати на проведення науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» розраховуємо як суму всіх попередніх статей витрат за формулою

$$B_{заг} = Z_o + Z_p + Z_{доо} + Z_n + M + K_6 + B_{спец} + B_{прз} + A_{обл} + B_e + B_{св} + B_{сп} + I_6 + B_{нзв}. \quad (4.17)$$

$$B_{заг} = 47190,99 + 4174,50 + 5136,55 + 12430,45 + 6792,50 + 14506,80 + 6600,00 + 469,70 + 5448,80 + 1110,68 + 0,00 + 0,00 + 25682,75 + 51365,49 = 180909,21 \text{ (грн)}.$$

Загальні витрати ZB на завершення науково-дослідної (науково-технічної) роботи та оформлення її результатів розраховується за формулою

$$ZB = \frac{B_{заг}}{\eta}, \quad (4.15)$$

де η - коефіцієнт, який характеризує етап (стадію) виконання науково-дослідної роботи, приймемо $\eta = 0,95$.

$$ZB = 180909,21 / 0,95 = 190430,74 \text{ (грн)}.$$

4.3 Оцінювання важливості та наукової значимості науково-дослідної роботи

Оцінювання та доведення ефективності виконання науково-дослідної роботи фундаментального чи пошукового характеру є достатньо складним процесом і часто базується на експертних оцінках, тому має вірогідний характер.

Для обґрунтування доцільності виконання науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» використовується

спеціальний комплексний показник, що враховує важливість, результативність роботи, можливість впровадження її результатів у виробництво, величину витрат на роботу.

Комплексний показник K_p рівня науково-дослідної роботи може бути розрахований за формулою

$$K_p = \frac{I^n \cdot T_C \cdot R}{B \cdot t}, \quad (4.16)$$

де I – коефіцієнт важливості роботи. Прийmemo $I = 4$;

n – коефіцієнт використання результатів роботи; $n = 0$, коли результати роботи не будуть використовуватись; $n = 1$, коли результати роботи будуть використовуватись частково; $n = 2$, коли результати роботи будуть використовуватись в дослідно-конструкторських розробках; $n = 3$, коли результати можуть використовуватись навіть без проведення дослідно-конструкторських розробок. Прийmemo $n = 3$;

T_C – коефіцієнт складності роботи. Прийmemo $T_C = 2$;

R – коефіцієнт результативності роботи; якщо результати роботи плануються вище відомих, то $R = 4$; якщо результати роботи відповідають відомому рівню, то $R = 3$; якщо нижче відомих результатів, то $R = 1$. Прийmemo $R = 4$;

B – вартість науково-дослідної роботи, тис. (грн). Прийmemo $B = 190430,74$ (грн);

t – час проведення дослідження. Прийmemo $t = 0,08$ років, (1 міс.).

Визначення показників I , n , T_C , R , B , t здійснюється експертним шляхом або на основі нормативів [64].

$$K_p = \frac{I^n \cdot T_C \cdot R}{B \cdot t} = 4^3 \cdot 2 \cdot 4 / 190,4 \cdot 0,08 = 32,26.$$

Якщо $K_p > 1$, то науково-дослідну роботу на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» можна вважати ефективною з високим науковим, технічним і економічним рівнем.

4.4 Висновки до розділу 4

Витрати на проведення науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» складають 190430,74 (грн). Відповідно до проведеного аналізу та розрахунків рівень наукового ефекту проведеної науково-дослідної роботи на тему «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» є середній, а дослідження актуальними, рівень доцільності виконання науково-дослідної роботи $K_p > 1$, що свідчить про потенційну ефективність з високим науковим, технічним і економічним рівнем.

ВИСНОВКИ

Магістерська робота «Мікроструктури та властивості MoS_2 композитного покриття» присвячена дослідженню сучасних матеріалів і технологій, спрямованих на створення композитних покриттів на основі дисульфиду молібдену (MoS_2), що мають низький коефіцієнт тертя, високу зносостійкість і стабільні механічні властивості.

У розділі 1 «Теоретичні основи дослідження композитних покриттів на основі MoS_2 » представлено огляд властивостей дисульфиду молібдену, його фізико-механічних і трибологічних характеристик. Зазначено, що покриття MoS_2 забезпечують коефіцієнт тертя на рівні 0.02–0.1 та твердість у діапазоні 1–2 ГПа, залежно від складу та технології нанесення. Розглянуто методи створення композитних покриттів, зокрема магнетронне розпилення, лазерне осадження та електроіскрове легування, з акцентом на їх переваги й обмеження. Ці дані закладають теоретичну базу для подальших експериментальних досліджень.

У розділі 2 «Експериментальне дослідження мікроструктури та властивостей композитного покриття на основі MoS_2 » описано процеси створення покриттів із додаванням домішок (5%, 10%, 15% титану). Досліджено фізико-механічні властивості, такі як мікротвердість (до 5 ГПа для покриттів з 15% Ti), модуль Юнга (до 219.7 ГПа для змішаних покриттів Ni-SiC- MoS_2) та коефіцієнт тертя (зниження до 0.07 при додаванні MoS_2). Результати показали, що оптимальним є вміст 10–15% титану, який забезпечує найкраще поєднання твердості та трибологічних властивостей.

Розділ 3 «Симуляційне дослідження покриттів на основі MoS_2 із використанням домішок» містить результати моделювання, які демонструють оптимізацію складу покриттів для забезпечення стійкості до вологості та термічної стабільності. Наприклад, для покриттів із вмістом 15% Ti максимальна температура експлуатації підвищується до 400°C без втрати трибологічних властивостей. Проведено аналіз легування титановими домішками, який дозволив зменшити коефіцієнт тертя на 20% у порівнянні з чистим MoS_2 .

У розділі 4 "Економічна частина" оцінено витрати на виконання науково-дослідної роботи, що склали 190,430.74 (грн). Деталізовано розподіл витрат на матеріали, енергоресурси та амортизацію обладнання. Розрахунки підтверджують, що застосування композитних покриттів на основі MoS_2 є економічно доцільним, враховуючи їхню довговічність і знижені витрати на обслуговування обладнання.

Усі розділи магістерської роботи поєднують теоретичні знання, експериментальні результати та практичні аспекти. Робота має високий рівень наукової новизни та сприяє розвитку технологій створення композитних покриттів для мікро- та наносистемної техніки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Семенов А.О., Оніщук М.О. Системи фазового автоматичного підстроювання частоти з використанням активної індуктивності на основі напівпровідникових структур. Збірник праць IX Міжнародної науково-практичної конференції «Сучасні проблеми інфокомунікацій, радіоелектроніки та наносистем (СПРН-2023)», 15-17 листопада 2023, Вінниця, ВНТУ. URL: <https://conferences.vntu.edu.ua/index.php/spirn/spirn2023/paper/view/19168>
2. Atomically Thin MoS₂: A New Direct-Gap Semiconductor, Mak et al., Phys. Rev. Lett., 105, 136805 (2010)
3. Broadband Absorption Enhancement in Solar Cells with an Atomically Thin Active Layer, J. Piper et al., ACS Photonics, 3 (4), 571-577 (2016)
4. Near-unity photoluminescence quantum yield in MoS₂, M. Amani et al., Science, 350 (6264), 1065-1068 (2015)
5. Exceptional Tunability of Band Energy in a Compressively Strained Trilayer MoS₂ Sheet, Y. Hui et al., ACS Nano, 7 (8), 7126-7131 (2013)
6. Tunable band gaps in bilayer transition-metal dichalcogenides, A. Ramasubramaniam et al., Phys. Rev. B, 84, 205325 (2011)
7. Few-Layer MoS₂: A Promising Layered Semiconductor, R. Ganatra et al., ACS Nano, 8 (5), 4074–4099 (2014)
8. Tightly bound trions in monolayer MoS₂, K. Mak et al., Nat Mater., 12 (3), 207-211 (2013)

9. Tunable Photoluminescence of Monolayer MoS₂ via Chemical Doping, S. Mouri et al., *Nano Lett.*, 13 (12), 5944–5948 (2013)
10. 2D Nanoelectronics: Physics and Devices of Atomically Thin Materials, M. Dragoman and D. Dragoman, Springer International Publishing (2017)
11. Highly Flexible MoS₂ Thin-Film Transistors with Ion Gel Dielectrics, J. Pu et al., *Nano Letters*, 12 (8), 4013 (2012)
12. Stretching and Breaking of Ultrathin MoS₂, S. Bertolazzi et al., *ACS Nano*, 5 (12), 9703 (2011)
13. Thermal Conductivity of Monolayer Molybdenum Disulfide Obtained from Temperature-Dependent Raman Spectroscopy, R. Yan et al., *ACS Nano*, 8 (1), 986–993 (2014)
14. Valleytronics in 2D materials, R. Schaibley et al., *Nature Reviews Materials*, 1, 16055 (2016)
15. Valley-selective circular dichroism of monolayer molybdenum disulphide, T. Cao et al. *Nature Communications*, 3, 887 (2012)
16. Spin and pseudospins in layered transition metal dichalcogenides, X. Xu et al., *Nature Physics*, 10, 343-350 (2014)
17. Roadmap on finding chiral valleys: screening 2D materials for valleytronics, F. Bussolotti et al., *Nano Futures*, 2, 032001 (2018)
18. Coupled Spin and Valley Physics in Monolayers of MoS₂ and Other Group-VI Dichalcogenides, D. Xiao et al., *Phys. Rev. Lett.*, 108, 196802 (2012)
19. Manipulating spin-polarized photocurrents in 2D transition metal dichalcogenides, L. Xie et al., *PNAS*, 113 (14), 3746-3750 (2016)
20. Valleytronics: Opportunities, Challenges, and Paths Forward, S. Vitale et al., *Small*, 1801483 (2018)
21. Single-layer MoS₂ transistors, B. Radisavljevic et al., *Nature Nanotechnology*, 6, 147-150 (2011)

22. Monolayer MoS₂ Transistors Beyond the Technology Road Map, K. Alam et al., IEEE Transactions on Electron Devices, 59 (12), 3250-3254 (2012)
23. Suppression of thermally activated carrier transport in atomically thin MoS₂ on crystalline hexagonal boron nitride substrates, M. Chan et al., Nanoscale, 5, 9572-9576 (2013)
24. High Performance Multilayer MoS₂ Transistors with Scandium Contacts, S. Das et al., Nano Lett., 13 (1), 100–105 (2013)
25. Ambipolar MoS₂ Thin Flake Transistors, Y. Zhang et al., Nano Lett., 12 (3), 1136-1140 (2012)
26. Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂, O. Sanchez et al., Nature Nanotechnology volume 8, pages 497–501 (2013)
27. Ultrahigh-Gain Photodetectors Based on Atomically Thin Graphene-MoS₂ Heterostructures, W. Zhang et al., Scientific Reports, 4, 3826 (2014)
28. Extraordinary Sunlight Absorption and One Nanometer Thick Photovoltaics Using Two-Dimensional Monolayer Materials, M. Bernardi et al., Nano Lett., 13 (8), 3664–3670 (2013)
29. Monolayer MoS₂ Heterojunction Solar Cells, M. Tsai et al., ACS Nano, 8 (8), 8317-8322 (2014)
30. Broad-Range Modulation of Light Emission in Two-Dimensional Semiconductors by Molecular Physisorption Gating, S. Tongay et al., Nano Lett., 13 (6), 2831-2836 (2013)
31. Fabrication of Single- and Multilayer MoS₂ Film-Based Field-Effect Transistors for Sensing NO at Room Temperature, H. Li et al., Small, 8 (1), 63-67 (2012)
32. Sensing Behavior of Atomically Thin-Layered MoS₂ Transistors, D. Late et al., ACS Nano, 7 (6), 4879–4891 (2013)
33. Metallic 1T phase MoS₂ nanosheets as supercapacitor electrode materials, A. Acerce et al., Nature Nanotechnology, 10, 313–318 (2015)

34. Electrical control of the valley Hall effect in bilayer MoS₂ transistors, J. Lee et al., *Nature Nanotechnology*, 11, 421–425 (2016)
35. Valley Polarization by Spin Injection in a Light-Emitting van der Waals Heterojunction, O. Sanchez et al., *Nano Lett.*, 16 (9), 5792–5797, 2016
36. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, K. Novoselov et al., *Science*, 306, (5696), 666-669 (2004)
37. Two-Dimensional Nanosheets Produced by Liquid Exfoliation of Layered Materials, J. Coleman et al., *Science*, 331, 568–571 (2011)
38. Large-Scale Exfoliation of Inorganic Layered Compounds in Aqueous Surfactant Solutions, R. Smith et al., *Adv. Mater.*, 23, 3944-3948 (2011)
39. Single layer MoS₂, P. Joensen et al., *Materials Research Bulletin*, 21 (4), 457-461 (1986)
40. Photoluminescence from Chemically Exfoliated MoS₂, G. Eda et al., *Nano Lett.*, 11 (12), 5111–5116 (2011)
41. Large-Area Vapor-Phase Growth and Characterization of MoS₂ Atomic Layers on a SiO₂ Substrate, Y. Zhan, *Small*, 8 (7), 966-971 (2012)
42. Growth of Large-Area and Highly Crystalline MoS₂ Thin Layers on Insulating Substrates, K. Liu et al., *Nano Lett.*, 12 (3), 1538–1544 (2012)
43. Two-Dimensional Transition Metal Disulfides for Chemoresistive Gas Sensing: Perspective and Challenges, T. Kim et al., *Chemosensors*, 5 (2), 15, (2017)
44. Epitaxial Growth of Two-Dimensional Layered Transition-Metal Dichalcogenides: Growth Mechanism, Controllability, and Scalability, H. Li et al., *Chem. Rev.*, 118 (13), 6134-6150 (2018)
45. Wang, G.; Liu, J.; Yang, J.; Liu, S.; Bu, L.; Chen, J. Study of the Performance of Laser Melting Wear-Resistant Coatings on TC4 Titanium Alloy Surfaces. *Coatings* 2024, 14, 730.

46. Luo, P.; Feng, W.; Zu, G.; Luo, L.; Xiao, J. Microstructure and Impact Toughness of Laser-Arc Hybrid Welded Joint of Medium-Thick TC4 Titanium Alloy. *Coatings* 2024, 14, 395.
47. Zhao, Y.; Li, X.; Fang, W. Microstructure and Mechanical Properties of TC4 Titanium Alloy at the Temperature of 77K. *Metals* 2023, 13, 1086.
48. Zhang, T.; Zhuang, H.; Zhang, Q.; Yao, B.; Yang, F. Influence of Y₂O₃ on the microstructure and tribological properties of Ti-based wear-resistant laser-clad layers on TC4 alloy. *Ceram. Int.* 2020, 46, 13711–13723.
49. Zhao, X.; Lyu, P.; Fang, S.; Li, S.; Tu, X.; Ren, P.; Liu, D.; Chen, L.; Xiao, L.; Liu, S. Microstructure and Wear Behavior of Ti-xFe-SiC In Situ Composite Ceramic Coatings on TC4 Substrate from Laser Cladding. *Materials* 2024, 17, 100.
50. Sui, X.; Weng, Y.; Zhang, L.; Lu, J.; Huang, X.; Long, F.; Zhang, W. Uncovering the Effect of CeO₂ on the Microstructure and Properties of TiAl/WC Coatings on Titanium Alloy. *Coatings* 2024, 14, 543.
51. Gao, W.; Wang, L.; Jin, Y.; Yao, Y.; Ding, Z.; Yang, W.; Liu, J. Effect of Si₃N₄/TaC Particles on the Structure and Properties of Microarc Oxidation Coatings on TC4 Alloy. *Coatings* 2022, 12, 1247.
52. Li, Q.; Meng, J.; Ding, H.; Hou, Y.; Li, S.; Hao, C.; Shi, X. Microstructure and Wear Resistance of Grx-Ti-BN Composite Coating on TC4 by Argon Arc Cladding. *Metals* 2024, 14, 403.
53. Weng, F.; Chen, C.; Yu, H. Research status of laser cladding on titanium and its alloys: A review. *Mater. Des.* 2014, 58, 412–425.
54. Zhang, Z.; Yang, Q.; Yu, Z.; Wang, H.; Zhang, T. Influence of Y₂O₃ addition on the microstructure of TiC reinforced Ti-based composite coating prepared by laser cladding. *Mater. Charact.* 2022, 189, 111962.
55. Monolayer MoS₂ Transistors Beyond the Technology Road Map, K. Alam et al., *IEEE Transactions on Electron Devices*, 59 (12), 3250–3254 (2012)

Додаток А
(обов'язковий)

ІЛЮСТРАТИВНА ЧАСТИНА

**МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТІ MOS2 КОМПОЗИТНОГО
ПОКРИТТЯ**

Виконав: студент 2-го курсу, групи МНТ-23м
спеціальності 176 Мікро- та наносистемна
техніка

(шифр і назва напряму підготовки, спеціальності)

 Оніщук М. О.

(прізвище та ініціали)

Керівник: д.т.н., проф., завідувач каф. ІРТС

 Осадчук О. В.

(прізвище та ініціали)

«10»

12

2024 р.

Вінниця ВНТУ – 2024 рік

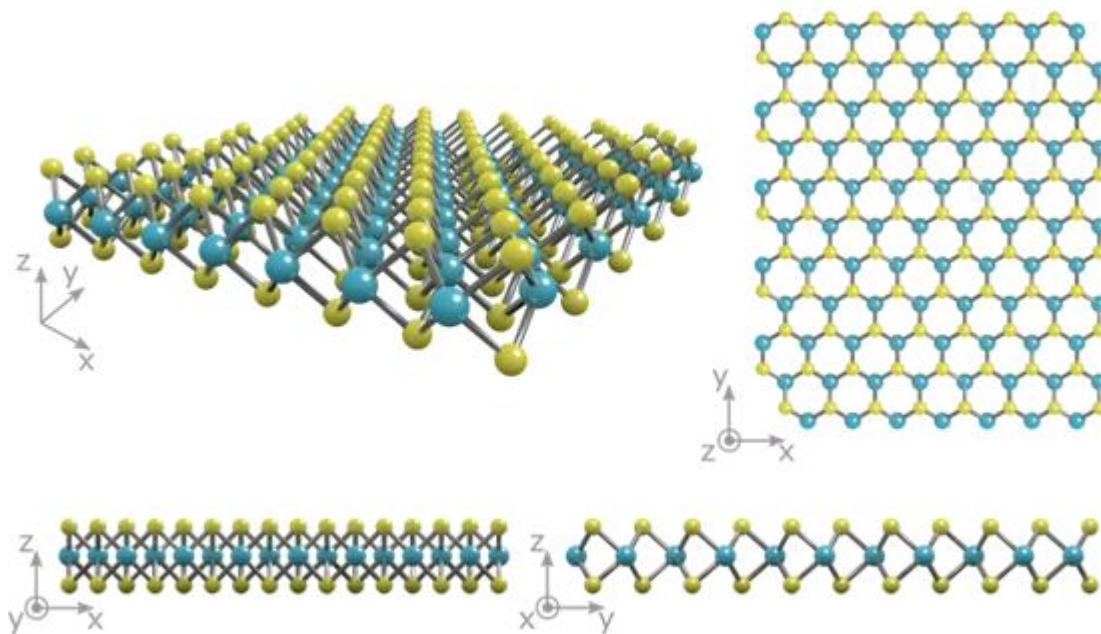


Рисунок 1 - Кристалічна структура моношару MoS_2 показує шар атомів молібдену (синій), затиснутий між двома шарами атомів сірки (жовтий)

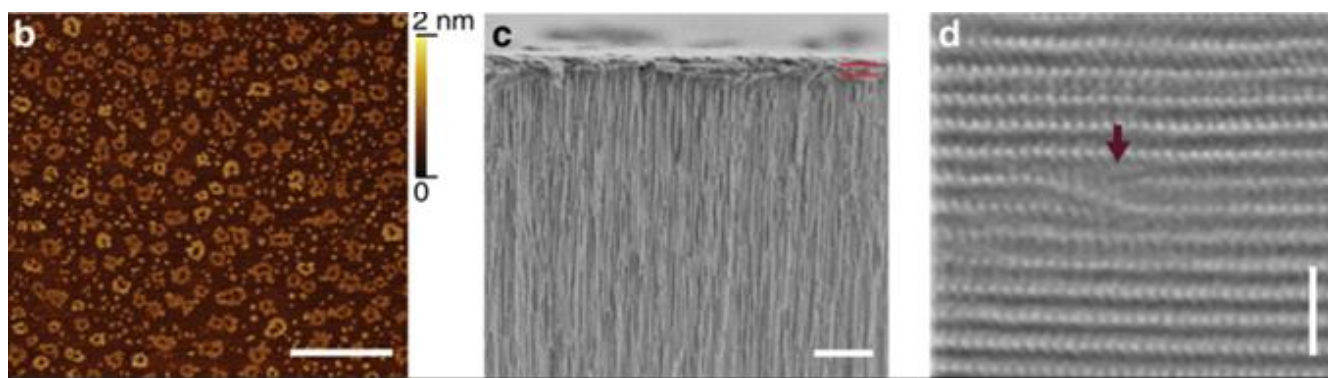


Рисунок 2 - b Топографічні атомно-силові мікрофотографії попередньо підготовлених пористих зразків MoS_2 . c Зображення SEM поперечного перерізу ламінатної мембрани NS/ND, закріпленої на фільтрі з анодискового оксиду алюмінію. d Показове зображення високої роздільної здатності HAADF STEM поперечного перерізу зразку, що демонструє відстань між шарами $6,2 \text{ \AA}$ та дефекти укладання, викликані пористістю нанолістів

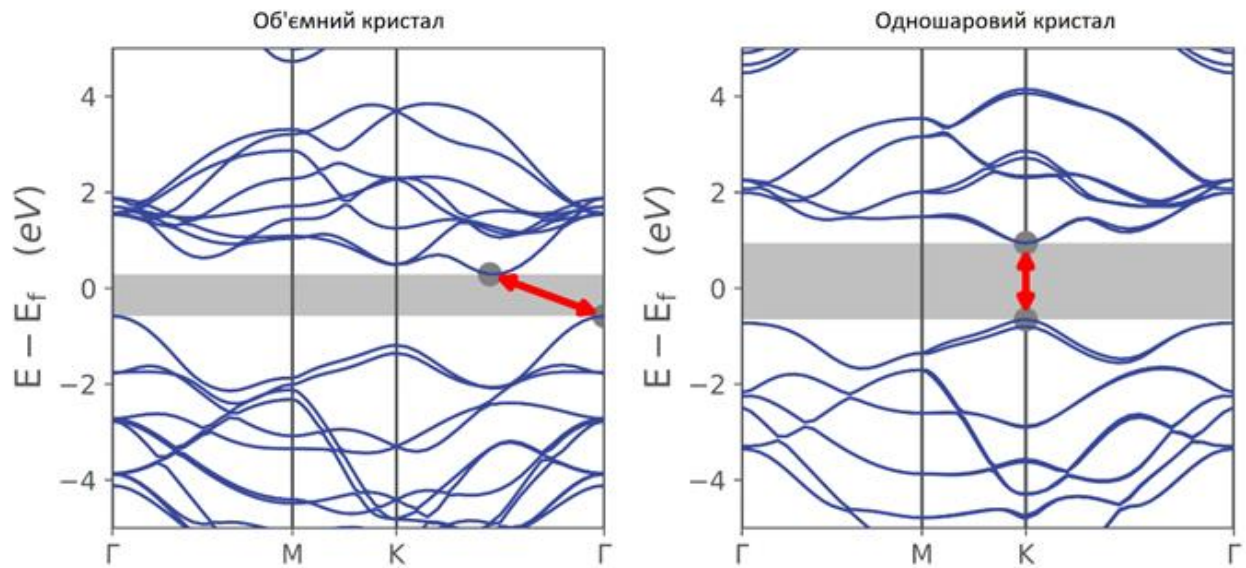


Рисунок 3 - Діаграма зонної структури об'ємного (ліворуч) і моношару MoS_2 (праворуч), що показує перехід від непрямої до прямої забороненої зони, що супроводжується розширенням забороненої зони

	σ^+ (K valley)	σ^- (K' valley)
E_A	$\uparrow e \downarrow h$	$\downarrow e \uparrow h$
E_B	$\downarrow e \uparrow h$	$\uparrow e \downarrow h$

Рисунок 4 – Схема носія заряду що обертається після вибіркового оптичного збудження.

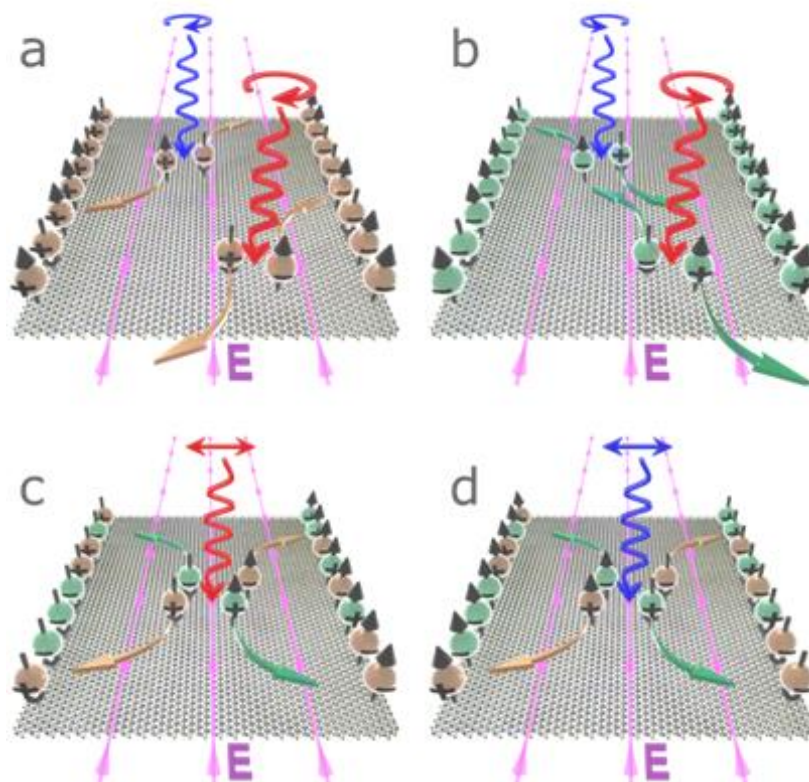


Рисунок 5 - а) σ^+ циркулярно поляризоване світло, що падає на моношар MoS_2 , збуджує носії заряду в К-западині (помаранчеві сфери). Світло з енергією, виродженою з А-екситоном (червона стрілка), збуджує електрони зі спіном вгору та дірки зі спіном вниз. Навпаки, світло, що відповідає В-екситону (синя стрілка), збуджує електрони зі спіном вниз і дірки зі спіном вгору. Електричне поле в площині змушує електрони накопичуватися на одному краю шару, а дірки – на іншому.

б) σ^- світло збуджує носії заряду в К'-западині (зелений) із спінами, протилежними спінам у К-западині, при цьому заряди також накопичуються на протилежних краях.

в) Лінійно поляризоване світло з енергією, виродженою з А-екситоном, збуджує заряди в обох западинах, при цьому носії з однаковими спінами збираються на тому самому краю шару.

г) Подібна ситуація реалізується після збудження лінійно поляризованим світлом, виродженим В-екситоном, зі спінами, що мігрують до протилежних сторін шару

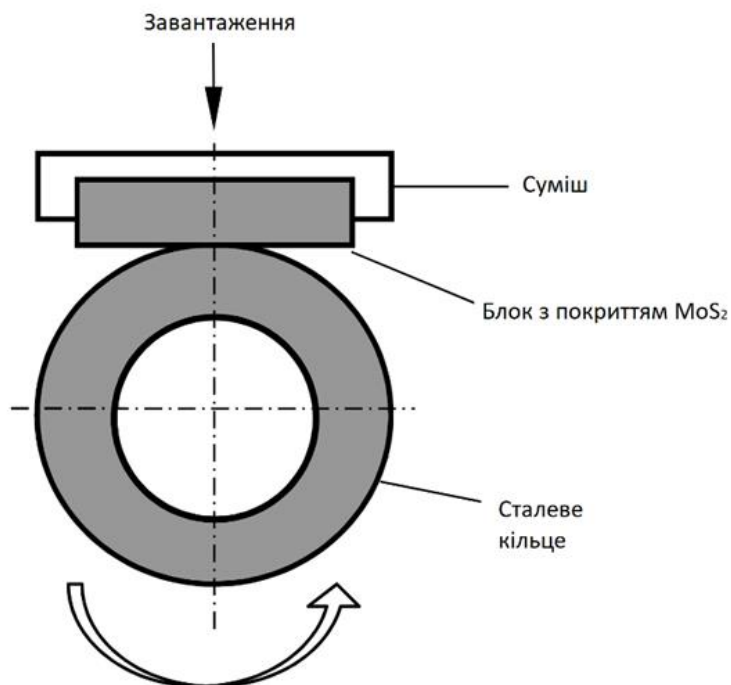


Рисунок 6 - Схематичне зображення механічного легування із використанням блоку з покриттям та сталевого кільця

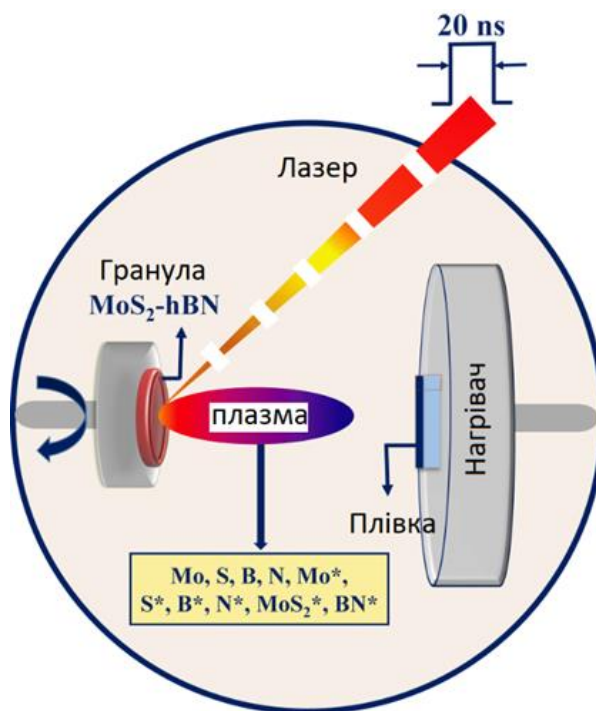


Рисунок 7 - Схематичне зображення лазерного осадження із використанням імпульсного лазера

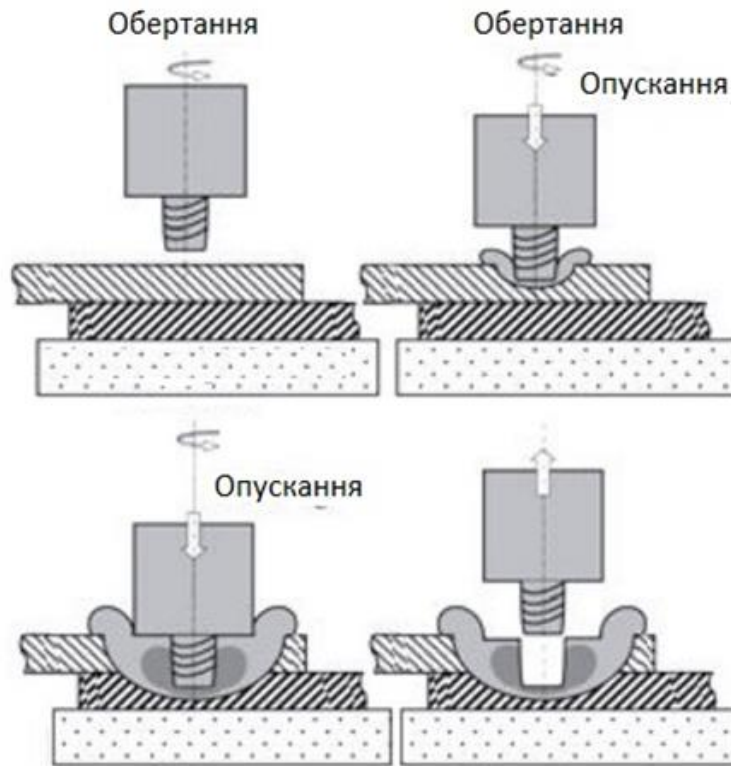


Рисунок 8 - Схематичне зображення фрикційно-переміщувального зварювання

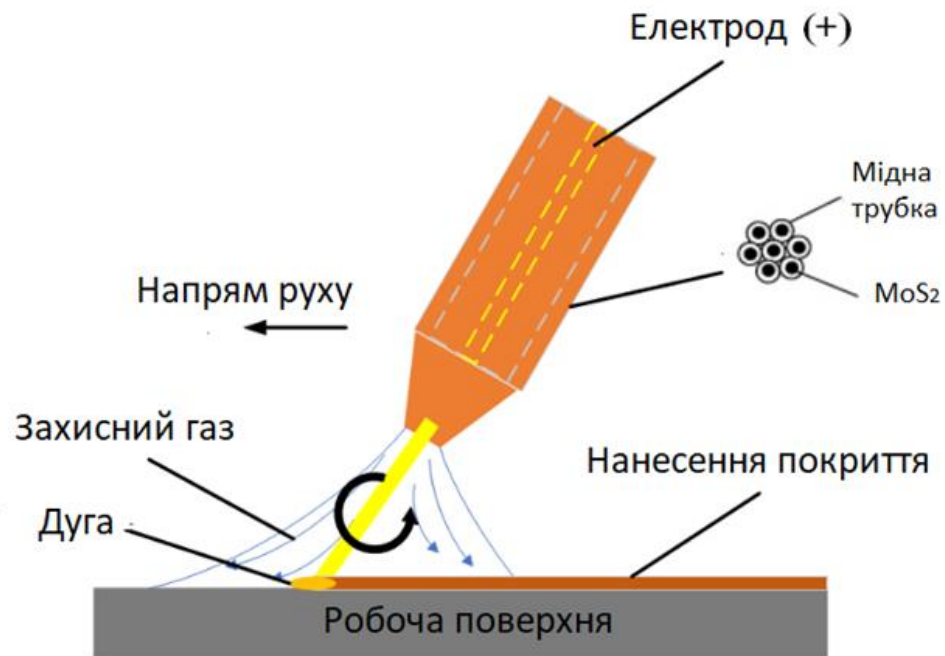


Рисунок 9 - Схематичне зображення нанесення шару MoS_2 шляхом електроіскрового легування

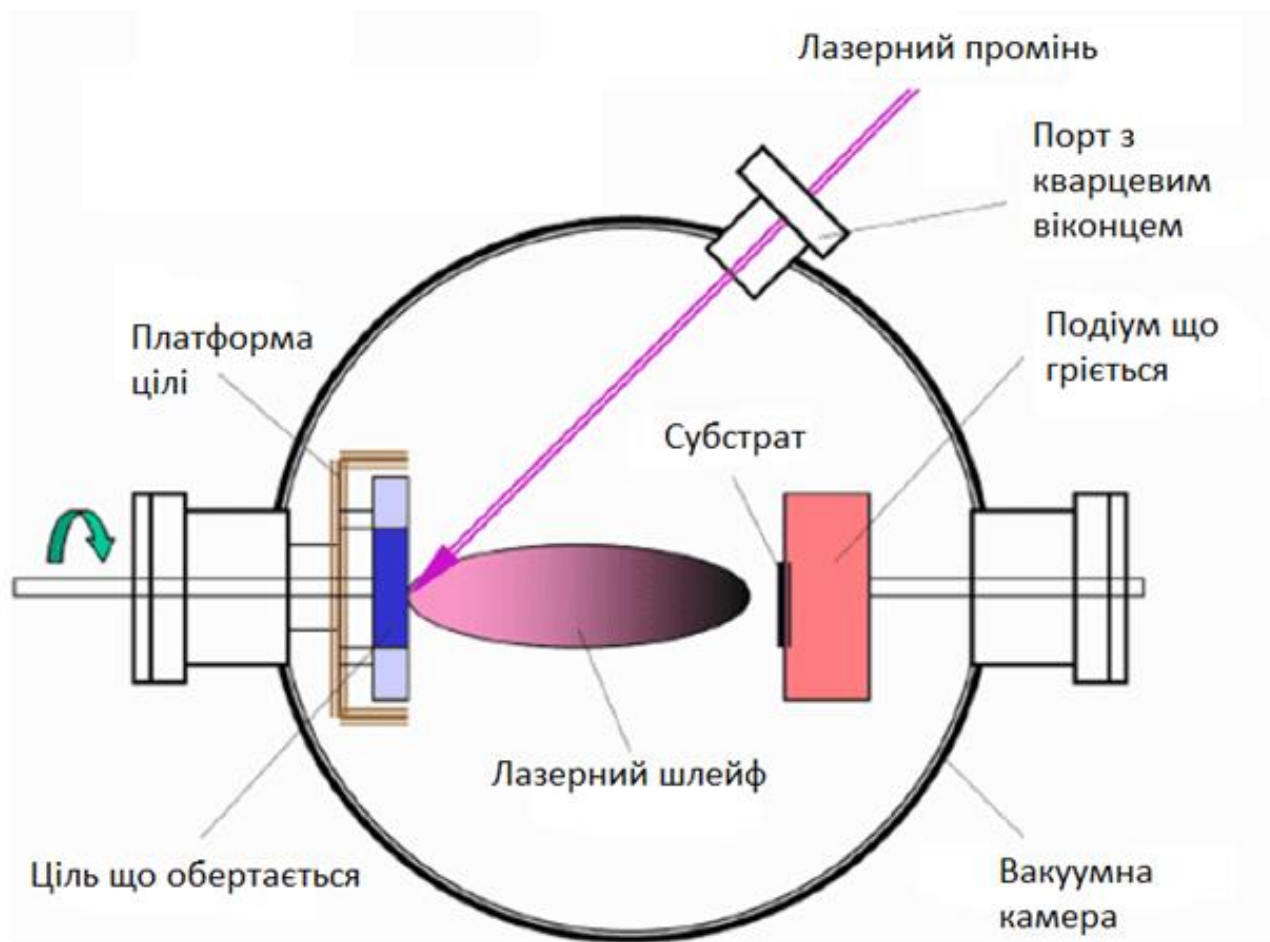


Рисунок 10 - Принципова схема пристрою PLD

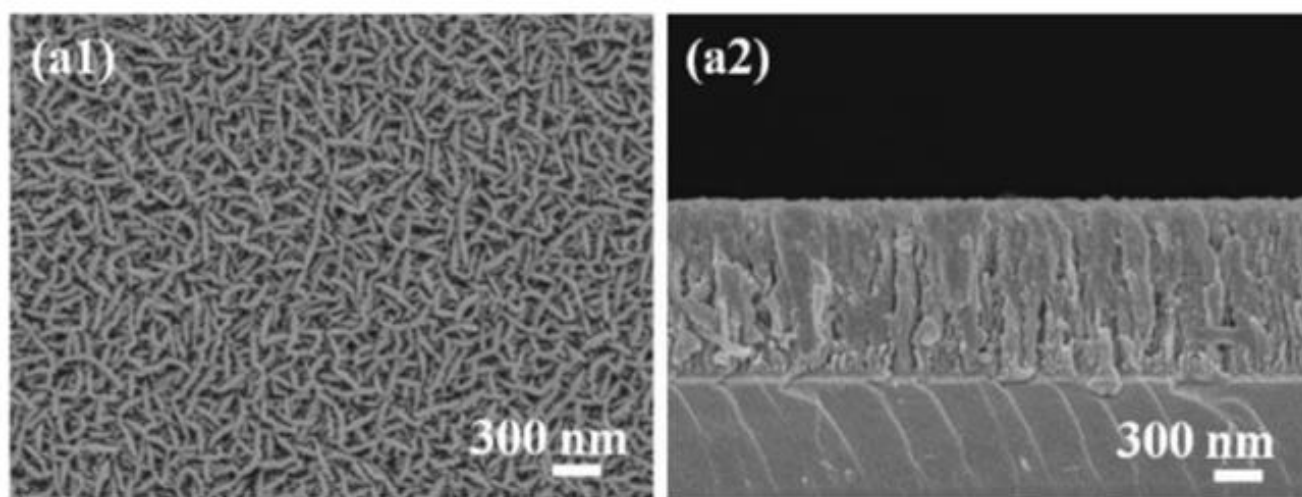


Рисунок 11 - Пориста та стовпчаста структурою чистої плівки MoS_2

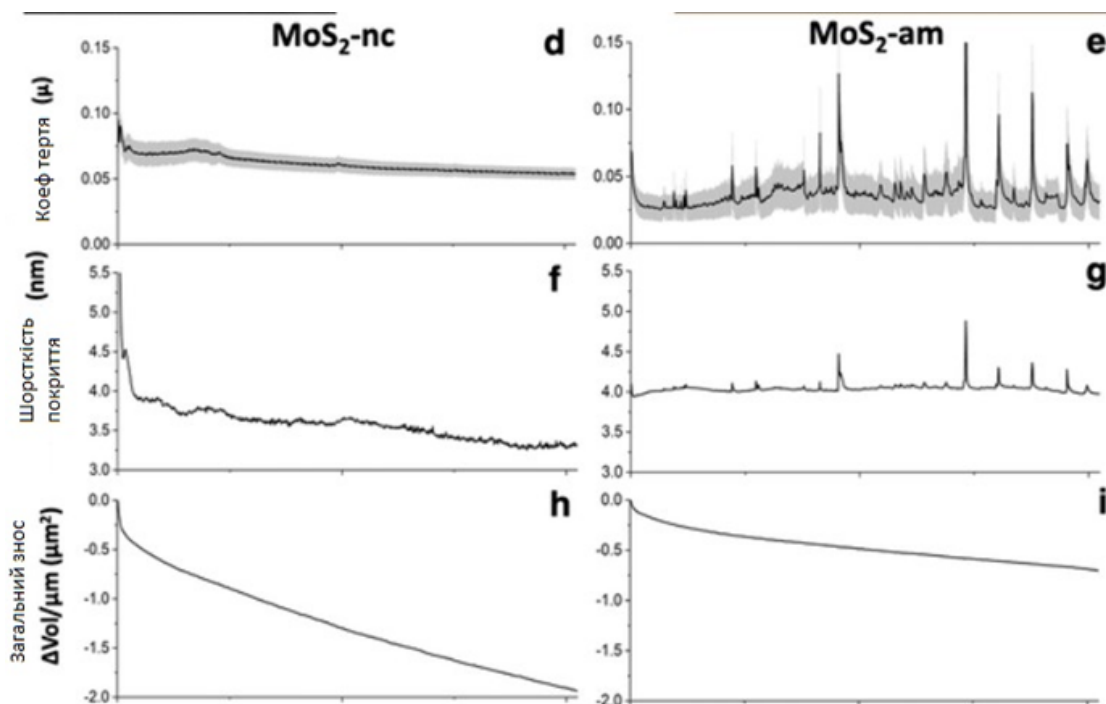


Рисунок 12 - Трибологічні характеристики нанокompозитного та афорфного покриттів MoS_2 методом силової мікроскопії тертя сталевим штапиком AISI 440C, прикріплений до консолі AFM високої жорсткості ($64 \pm 4 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$); d,e - коефіцієнт зміни тертя (чорний) зі стандартним відхиленням (сірий); f,g - зміна середньоквадратичного шорсткості; h,i - сукупний обсяг зносу на мкм пройденого шляху

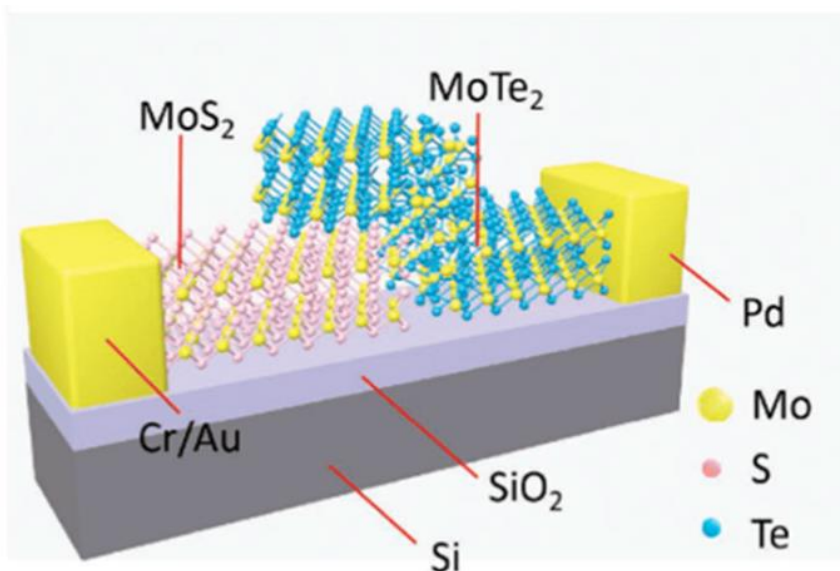


Рисунок 13 – Схема фотоприймача на основі гетеропереходу MoS_2 і MoTe_2 .

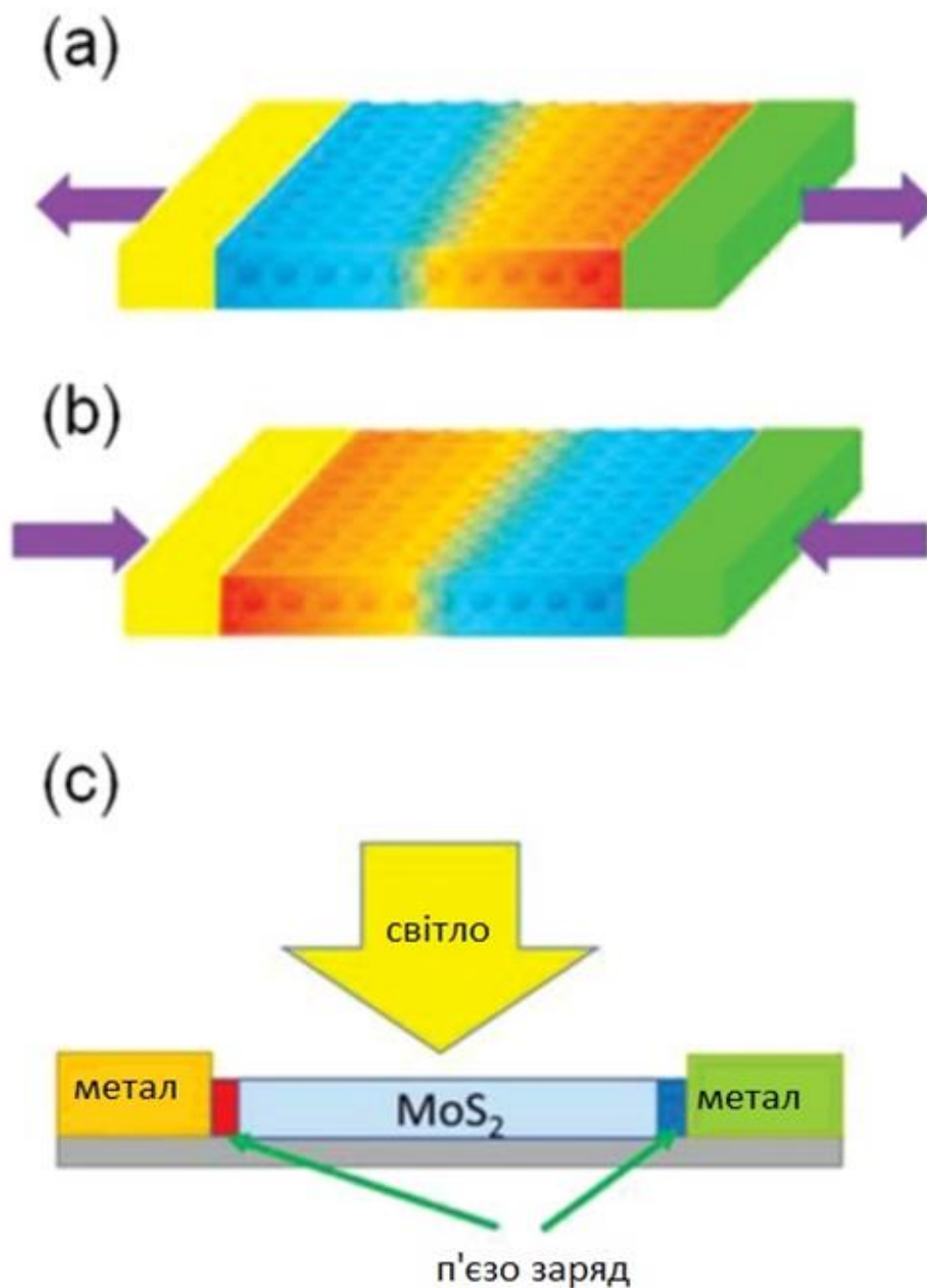


Рисунок 14 - Моношаровий сонячний елемент Шотткі MoS₂ під різними деформаціями. а) Схематична структура та енергетичні зонні діаграми моношарового сонячного елемента Шотткі MoS₂ під дією деформації стиску. б) Схематична структура та енергетичні зонні діаграми моношарового сонячного елемента Шотткі MoS₂ під дією розтягу. в) Схематичні компоненти моношарової сонячної батареї Шотткі MoS₂.

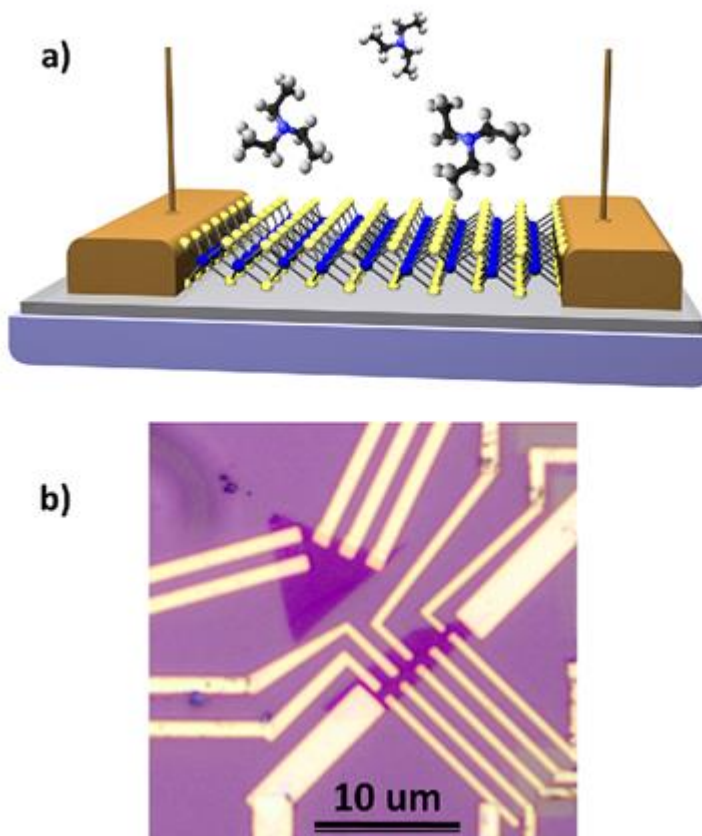


Рисунок 15 - Схема та зображення моношарового датчика MoS_2 . (а) Один моношар MoS_2 підтримується на підкладці SiO_2/Si і контактує з контактними майданчиками Au . (b) Оптичне зображення оброблених пристроїв

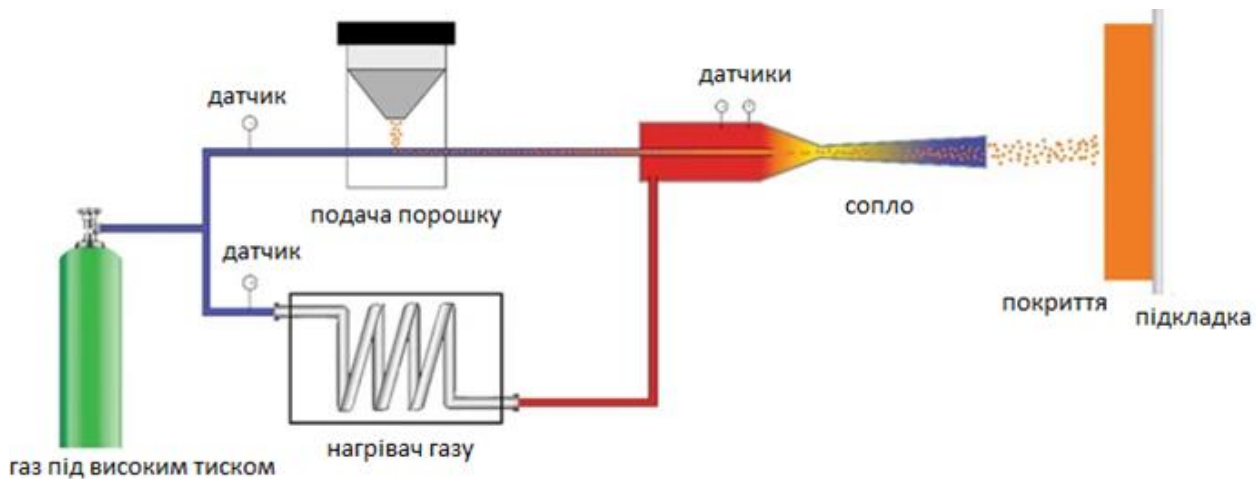


Рисунок 16 - Схема роботи апарата імпульсного газотермічного наплення (PGDS)

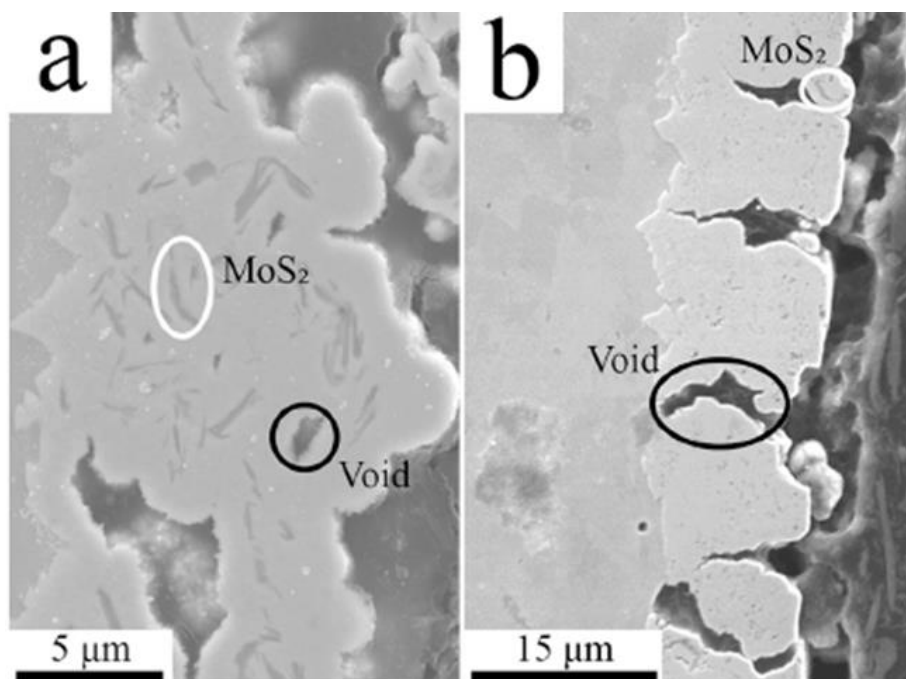


Рисунок 17 - Електронна мікроскопія зображення поперечного перерізу композитів, отриманих при перемішуванні. (a) Ni-MoS₂/DC₄ (b) Суміш Ni-DC₄.

Частинки MoS₂ позначені білим кольором, а порожнечі – чорного кольору

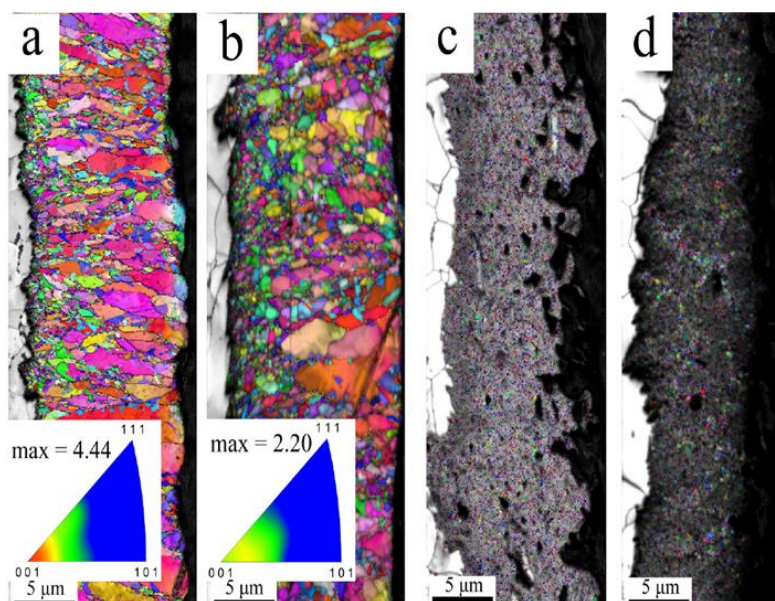


Рисунок 18 - Карта орієнтації, включаючи максимальну інтенсивність текстури в одиницях кратності випадкового розподілу (mrd), як зазначено кольором бар. (a)

Чистий Ni (DC4/US) (b) Ni-SiC (DC4/US) (c) Ni-MoS₂ (DC4/US) (d) Ni-Mix (DC2.3/US)

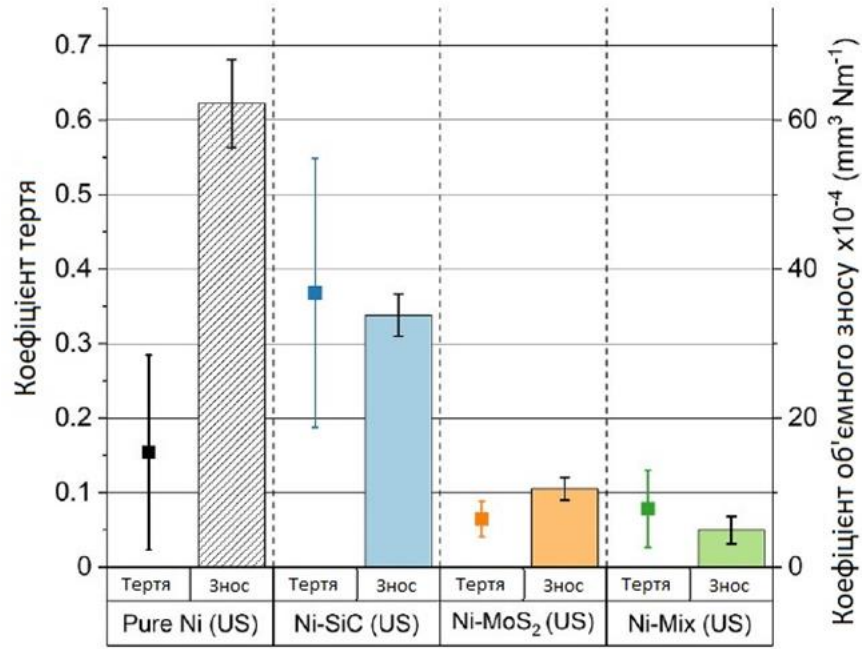


Рисунок 19 - Середній коефіцієнт тертя (COF) і об'ємний коефіцієнт зносу $\times 10^4 (\text{мм}^3 \text{Нм} \cdot 1)$

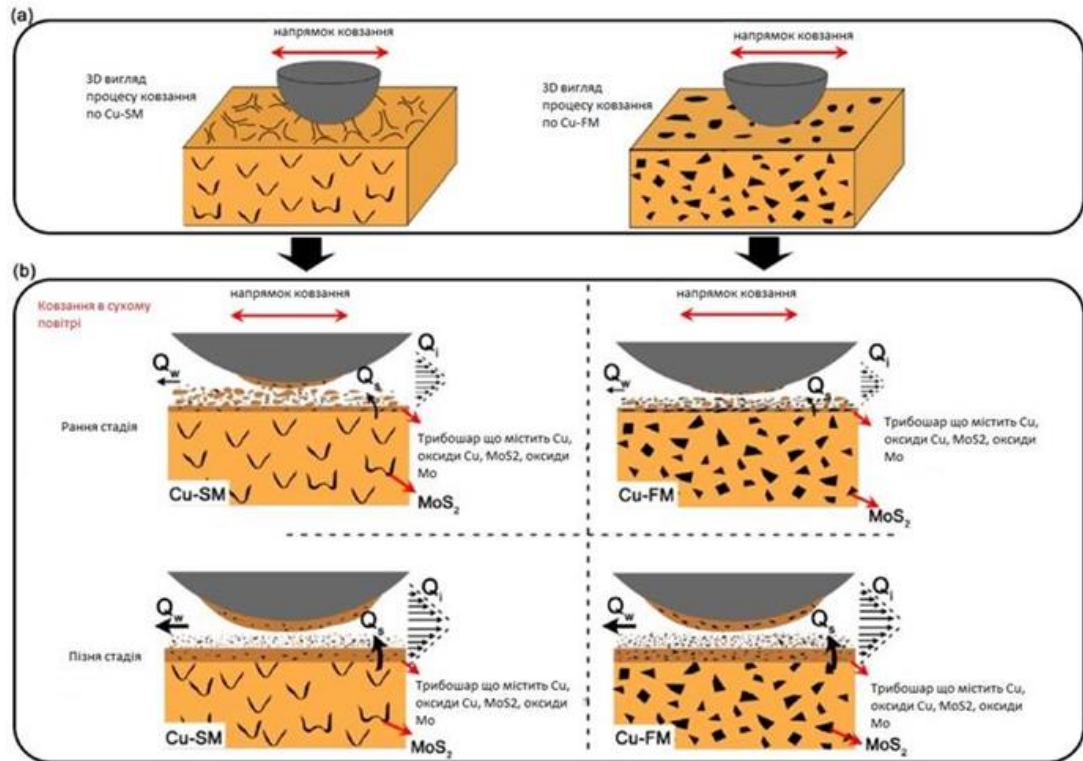


Рисунок 20 - Схема потоку третього тіла на контактних поверхнях Cu-SM і Cu-FM, що ковзають по Al_2O_3 на різних стадіях в нітрогені

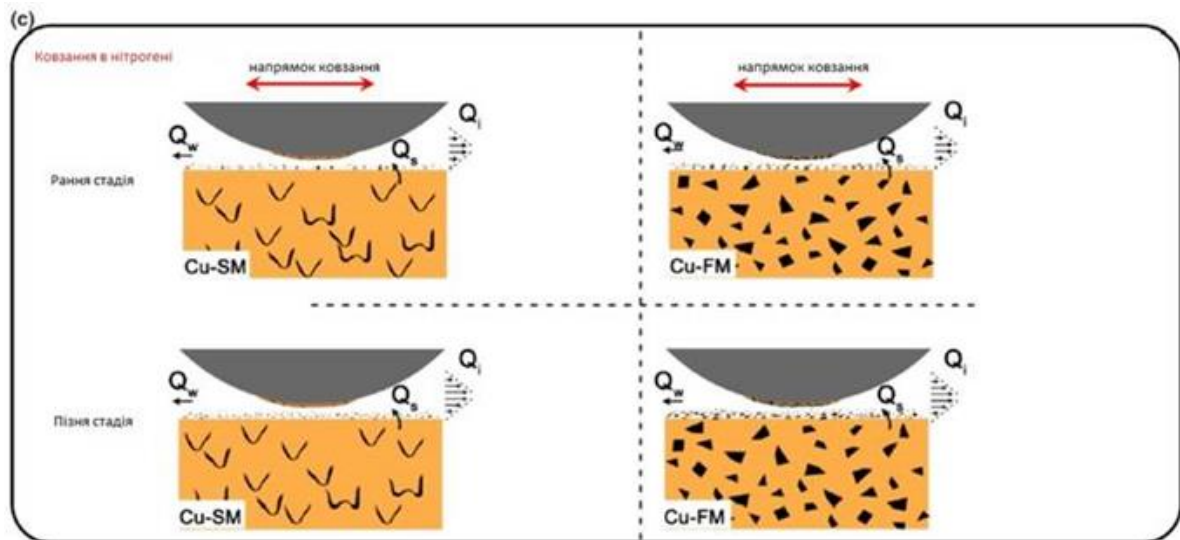


Рисунок 21 - Схема потоку третього тіла на контактних поверхнях Cu-SM і Cu-FM, що ковзають по Al_2O_3 на різних стадіях в нітрогені

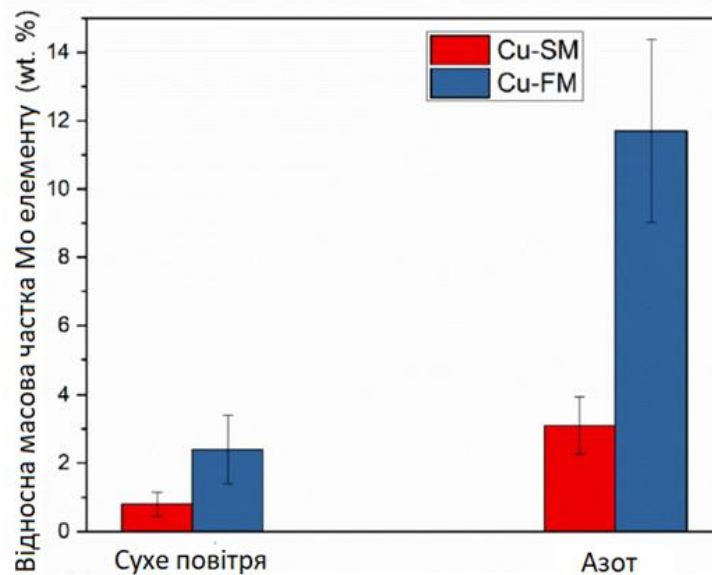


Рисунок 22 - Відносна масова частка елемента Мо в перенесених матеріалах на протилежних поверхнях, що сполучаються з Cu-SM і Cu-FM після ковзання протягом 1000 циклів у сухому повітрі та азоті

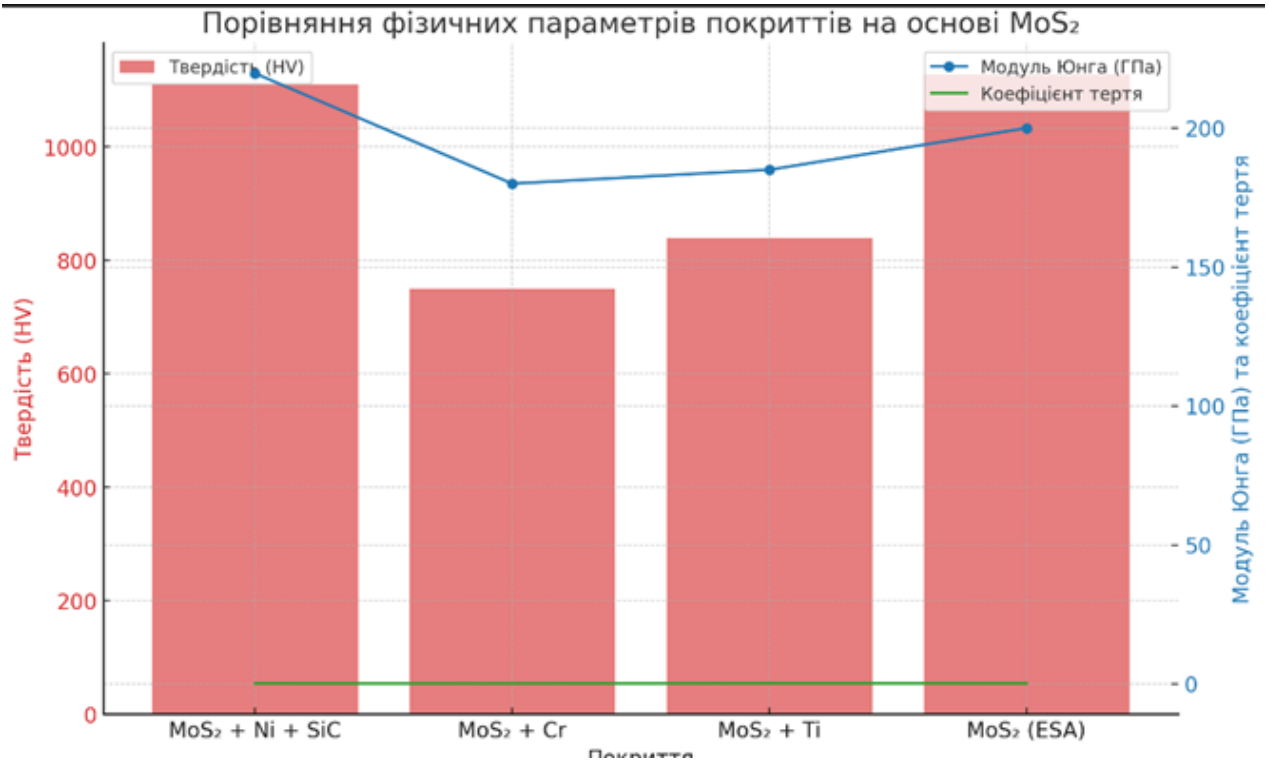


Рисунок 23 - Графік, що порівнює фізичні параметри різних покриттів на основі MoS₂.

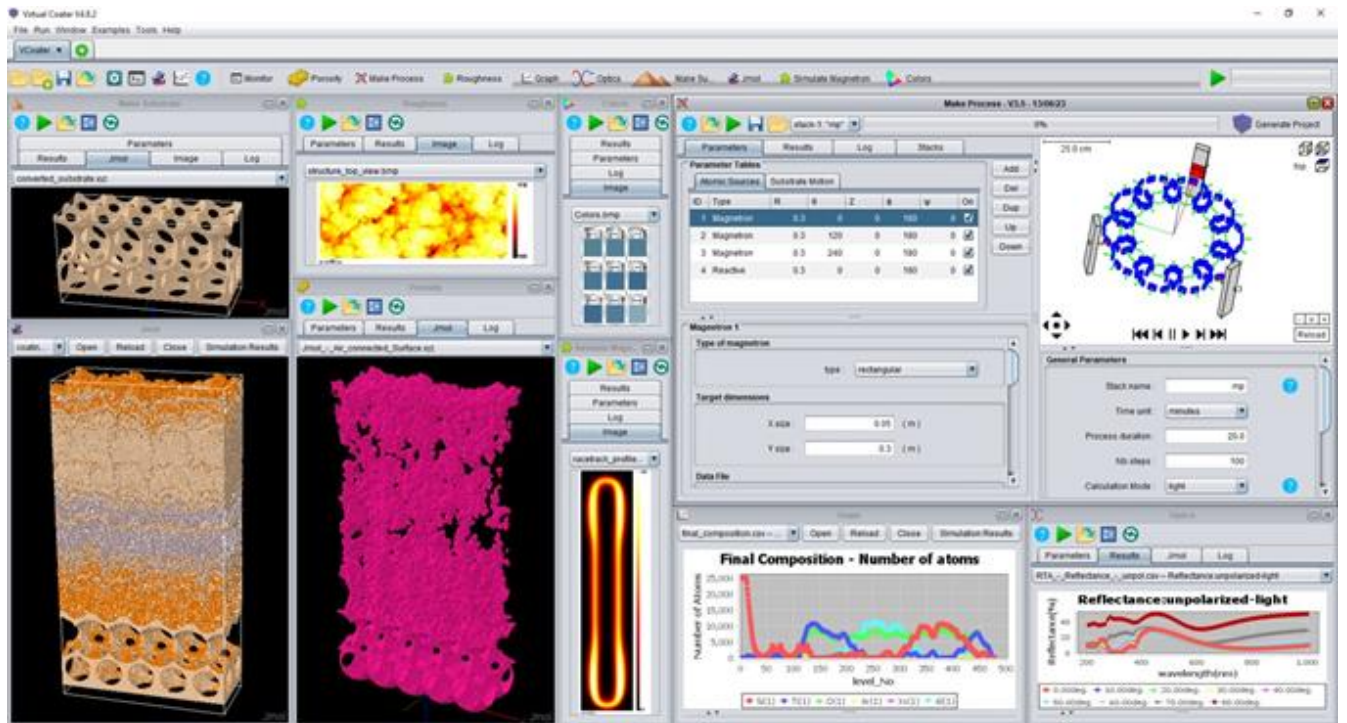


Рисунок 24 - Приклад графічного інтерфейсу Virtual Coater V4.8.2

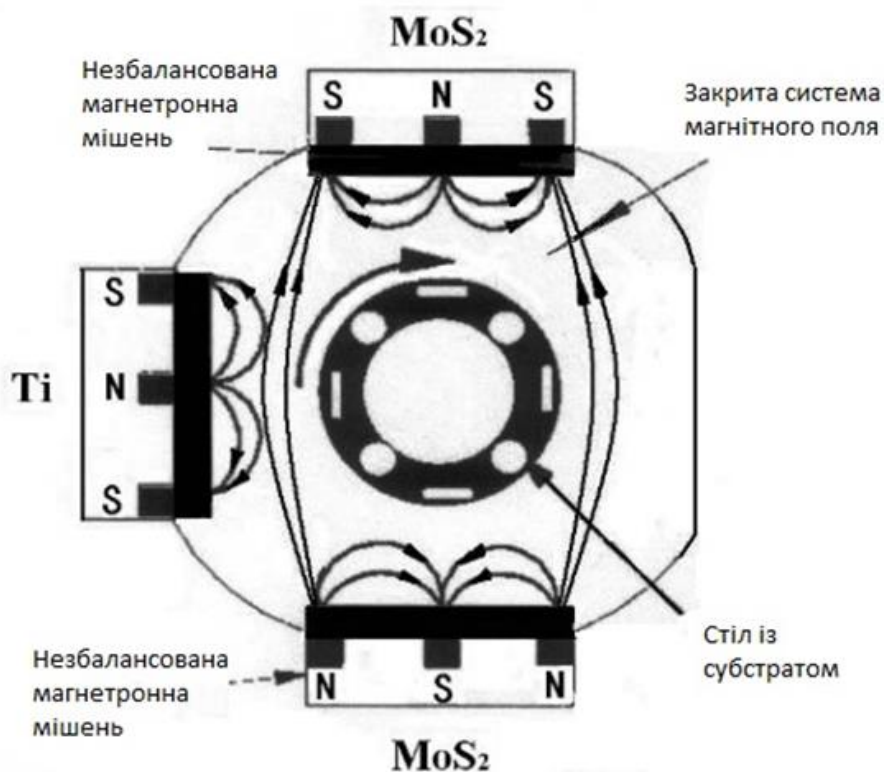


Рисунок 25 - Схематичне зображення камери покриття

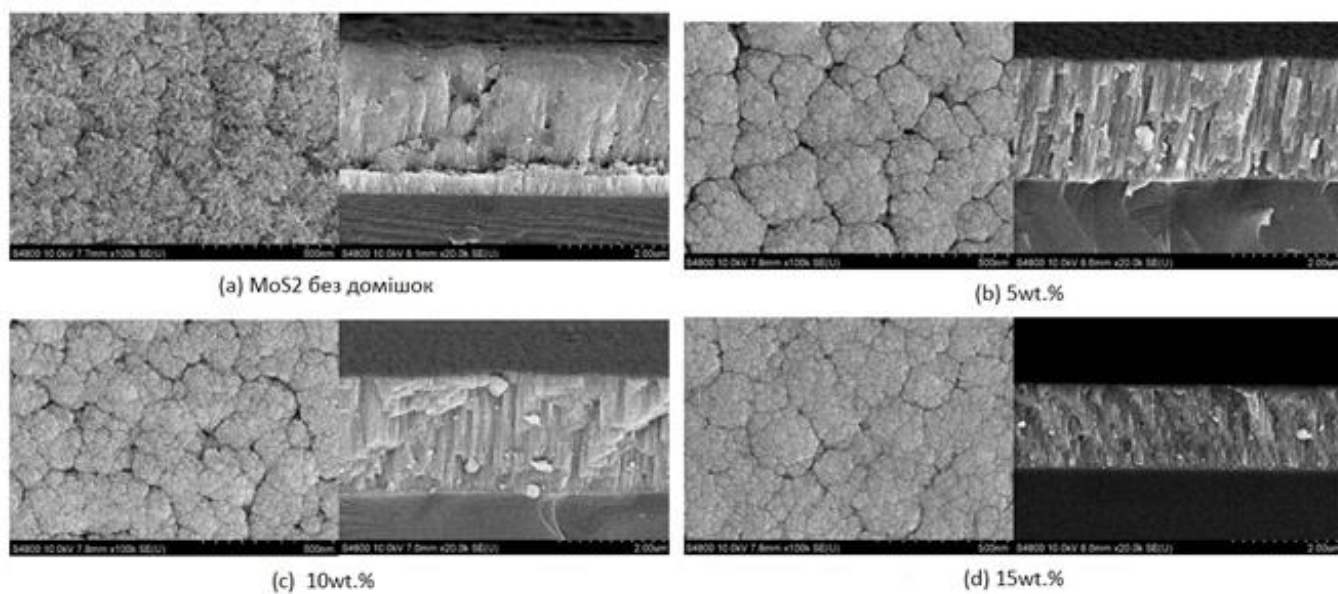


Рисунок 26 - Мікрофотографії поверхні та поперечних перерізів композитних покриттів MoS-Ti з різним вмістом Ti

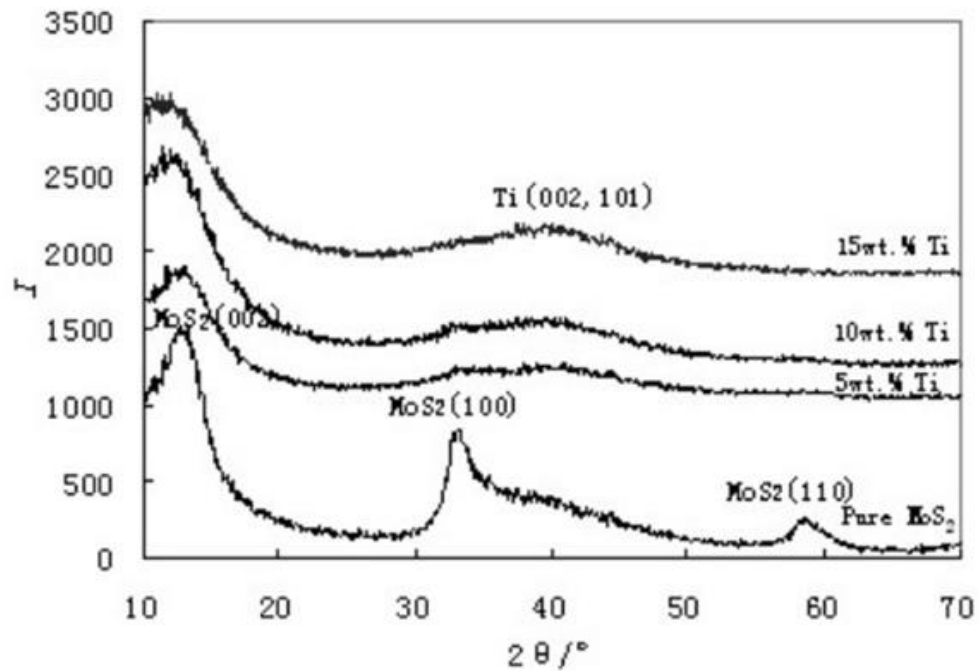


Рисунок 27 - Рентгенограми композитних покриттів MoS₂-Ti

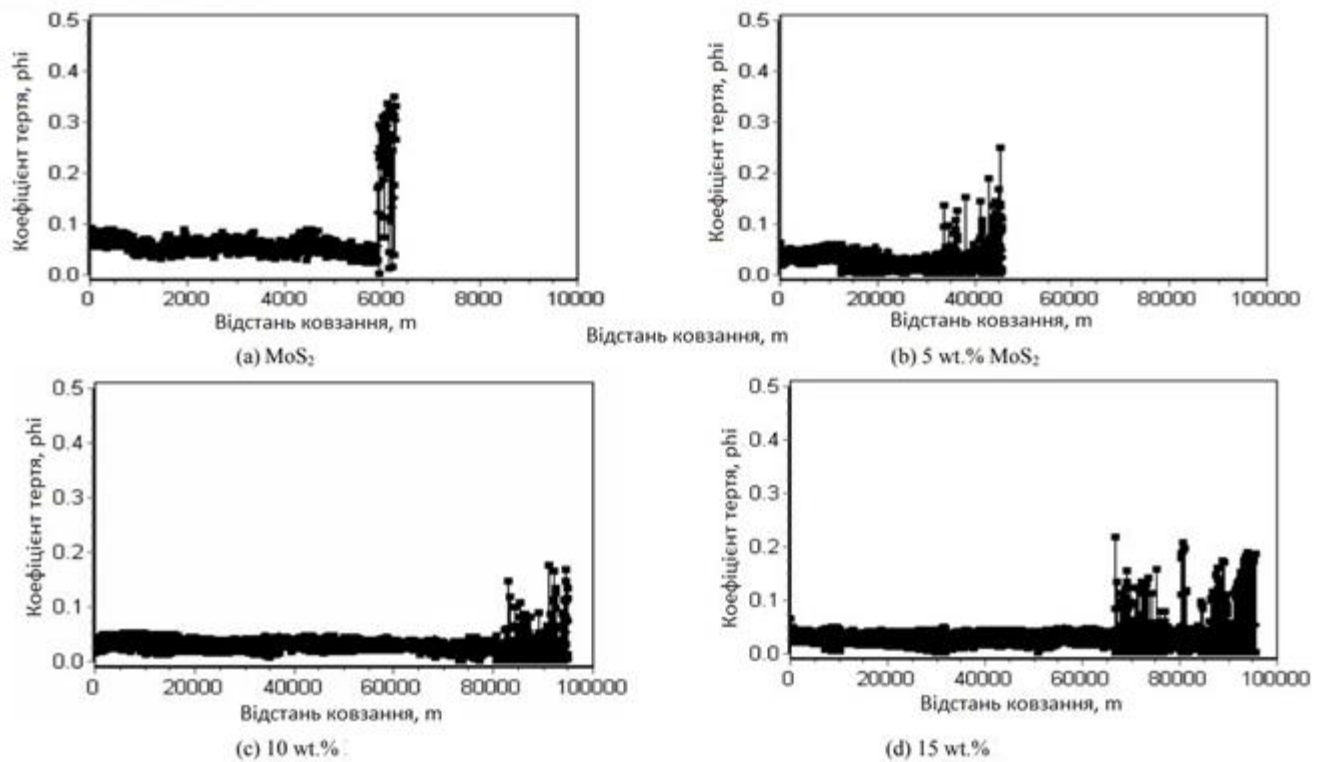


Рисунок 28 - Результати випробувань композиційних покриттів MoS-Ti кулькою на диску з різним вмістом Ti у повітряному середовищі

Додаток Б (обов'язковий) Протокол перевірки навчальної (магістерської)
кваліфікаційної роботи

ПРОТОКОЛ ПЕРЕВІРКИ РОБОТИ

**МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТІ MoS_2 КОМПОЗИТНОГО
ПОКРИТТЯ**

ПРОТОКОЛ
ПЕРЕВІРКИ КВАЛІФІКАЦІЙНОЇ РОБОТИ
НА НАЯВНІСТЬ ТЕКСТОВИХ ЗАПОЗИЧЕНЬ

Назва роботи: «Мікроструктури та властивості MoS2 композитного покриття»

Тип роботи: МКР
(БДР, МКР)

Підрозділ ІРТС, ІЕС
(кафедра, факультет)

Показники звіту подібності Turnitin

Оригінальність 97,0% Схожість 3,0%

Аналіз звіту подібності (відмітити потрібне):

- ☒ 1. Запозичення, виявлені у роботі, оформлені коректно і не містять ознак плагіату.
- ☐ 2. Виявлені у роботі запозичення не мають ознак плагіату, але їх надмірна кількість викликає сумніви щодо цінності роботи і відсутності самостійності її виконання автором. Роботу направити на розгляд експертної комісії кафедри.
- ☐ 3. Виявлені у роботі запозичення є недобросовісними і мають ознаки плагіату та/або в ній містяться навмисні спотворення тексту, що вказують на спроби приховування недобросовісних запозичень.

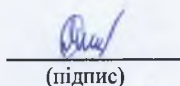
Особа, відповідальна за перевірку


(підпис)

Андрій СЕМЕНОВ
(прізвище, ініціали)

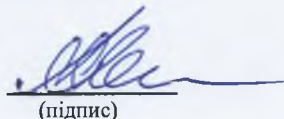
Ознайомлені з повним звітом подібності, який був згенерований системою Unichesk щодо роботи.

Автор роботи


(підпис)

Микола ОНІЩУК
(прізвище, ініціали)

Керівник роботи


(підпис)

Олександр ОСАДЧУК
(прізвище, ініціали)