

1. Cel projektu.

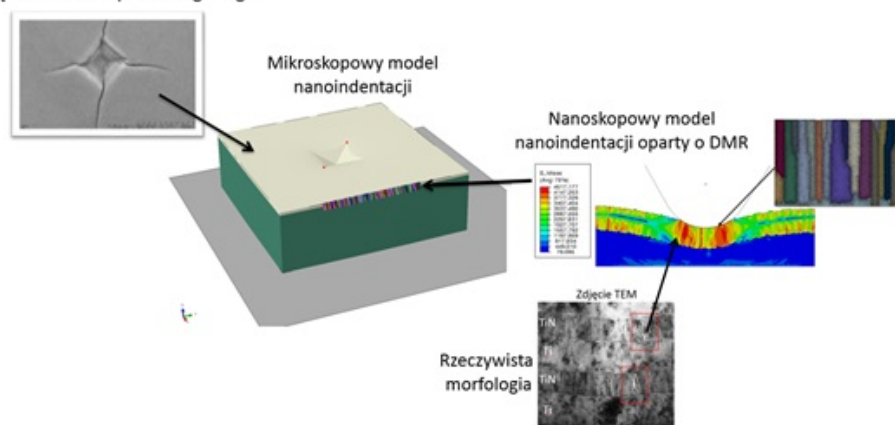
Celem projektu jest opracowanie nowatorskich i unikatowych w skali światowej numerycznych narzędzi do wsparcia procesu projektowania nanometrycznych struktur warstwowych tytanu (Ti) i azotku-tytanu (TiN) uzyskanych na drodze ablacji laserowej (napylania) PLD znajdujących zastosowanie w wielu gałęziach przemysłu.

2. Tematyka badawcza.

Projektowanie nowych materiałów, w których skład wchodzi powłoki napylane metodami ablacji laserowej wymagają znacznych nakładów finansowych. Nanometryczny wymiar napylanych warstw nie pozwala na wykorzystanie standardowej aparatury badawczej wspierającej proces projektowania. Wymagany jest bezprosty dostęp do nowoczesnej aparatury, której koszt wykorzystania jest bardzo wysoki. Dlatego istotnym staje się ograniczenie ilości roboczogodzin pracy specjalistycznego sprzętu np. transmisyjnego mikroskopu elektronowego (ang. TEM) lub nanoindentera do minimum. Rozwiązaniem tego problemu, który stanowi istotną część wnioskowanego projektu, bazuje na opracowaniu modeli numerycznych, których zadaniem jest odwzorowanie zjawisk zachodzących w nanowarstwach podczas rzeczywistej deformacji. Modele te wykonane zostaną przy wykorzystaniu podejścia opartego na idei cyfrowej reprezentacji materiału (ang. Digital Material Representation - DMR). Wykonane zgodnie z podejściem DMR struktury, wiernie odzwierciedlają nie tylko dokładną morfologię badanych nanowarstw, lecz również uwzględniają właściwości mechaniczne elementów struktury takich nanowarstw. Opracowane DMR wykorzystane zostaną w wieloskalowych modelach numerycznych testu nanoindentacji (Rys. 1). Model nanoindentacji utworzony w mikroskali zostanie udoskonalony o modelowanie obejmujące nanoskalę odpowiednią materiałowi na zadane przemieszczenie. Takie podejście, w którym połączone zostaną dokładne odwzorowanie morfologii materiału nanoskalonego z uwzględnieniem ich mechanicznych właściwości przybliżone numeryczne przewidywania zachowania się nanowarstw podczas rzeczywistej deformacji.

Wygenerowanie rzeczywistej struktury do symulacji numerycznej jest niezwykle istotne w momencie, gdy wymagane jest uzyskanie dokładnych informacji o materiale uwzględniając jego specyficzny budowę. Powłoki nanoszone posiadają bardzo niejednorodną powierzchnię na skutek metody ich wytwarzania. Niejednorodności mają znaczny wpływ na wartości koncentracji naprężeń występujących w powłokach. Dlatego dokładne ich odzwierciedlenie ma ogromne znaczenie dla jakości otrzymywanych wyników analizy numerycznej. Wygenerowana w pracy struktura będzie miała format przyjazny dla szeroko wykorzystywanych aplikacji numerycznych ułatwiających jej praktyczne wykorzystanie. Wymiernymi korzyściami będzie możliwość połączenia rozwiązań z wieloma innymi istniejącymi modelami numerycznymi, w których odzwierciedlenie struktury zostało zminimalizowane lub

Zdjęcie z mikroskopu skaningowego



opominięte.

Rys. 1 Wieloskalowy model nanoindentacji.

3. Badania podstawowe.

Pracę podzielono na dwa główne etapy: eksperymentalny oraz numeryczny (teoretyczny).

Eksperymentalny:

Pierwszy etap będzie obejmował prace związane z przygotowaniem próbek powlekanych nanowarstwami metodą ablacji PLD. Następnie wykonane zostaną badania eksperymentalne, gdzie przy wykorzystaniu nanoindentacji otrzymane zostaną szczegółowe informacje o zachowaniu materiału podczas lokalnej znacznej deformacji plastycznej. Na tym etapie wykonana zostanie również analiza mikrostruktury i jej cech morfologicznych, która pozwoli na późniejsze wygenerowanie cyfrowych reprezentacji materiału do obliczeń numerycznych. Podczas próby nanoindentacji zarejestrowane zostaną wykresy siły w funkcji przemieszczenia, które zostaną użyte do porównania z modelami numerycznymi procesu nanoindentacji.

Numeryczny (teoretyczny):

Drugi etap projektu będzie oparty na badaniach numerycznych. Podczas tej części projektu zbudowany będzie model numeryczny procesu nanoindentacji wykonany w mikroskali oraz przygotowana zostanie cyfrowa reprezentacja badanego materiału wraz z pełną wirtualną reprezentacją cech morfologicznych. Aby otrzymać cyfrowe próbki materiału, które wiernie odwzorują morfologię rzeczywistej struktury badanego materiału, wykorzystane zostaną dwie metody: pierwsza bazująca na rzeczywistych zdjęciach mikrostruktury (2D) i druga na bazie metod analizy dyskretnych np. Automatów Komórkowych (ang. CA – Cellular Automata) czy Monte Carlo (MC) dla reprezentacji materiału w 2D i 3D. Następnym krokiem będzie połączenie numerycznego modelu w skali mikro z cyfrową reprezentacją materiału w skali nano tworząc model wieloskalowy. Dzięki takim stworzonym narzędziom, możliwe będzie przeprowadzenie szczegółowej analizy zachowania materiału na podstawie symulacji numerycznych procesu nanoindentacji, co pozwoli na zweryfikowanie modeli z wynikami uzyskanymi w rzeczywistym teście. Ogólny plan badań schematycznie przedstawiono na Rys. 2.



Rys. 2 Ogólna idea projektu i podstawowe zadania.