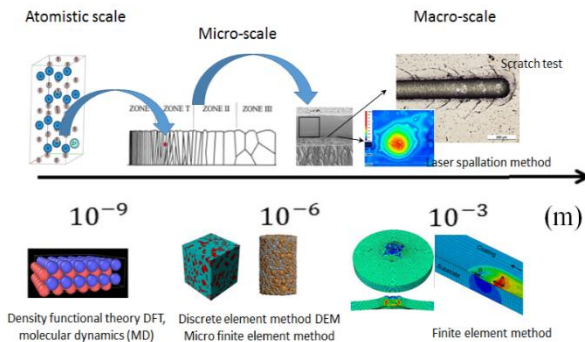


Materiały twarde i odporne na uszkodzenia – ich obróbka i zastosowanie – znajdują się w centrum uwagi od tysięcy lat. Niezniszczalne narzędzia często ratowały życie i pozwalały na postęp cywilizacji. Obecnie badania odpornych w ekstremalnych warunkach na uszkodzenia materiałów osiągają najwyższy poziom w historii, rozwijając się i przyciągając uwagę przemysłu oraz funduszy na całym świecie. Wiąże się to ze zwiększeniem efektywności produkcji, ale także z planowanymi w najbliższym czasie podróżami w kosmos. Obecnie istnieje trend zastępowania drogich lub trudnych w syntezie materiałów, takich jak diament na ich znacznie tańszymi odpowiednikami. Często materiały komercyjne pokrywane są cienkimi warstwami, co znacznie poprawia ich niezawodność. Głównym problemem stosowania supertwardej i odpornej termicznie ceramiki w postaci warstw ochronnych jest jej kruchość i trudności z przyczepnością do znacznie bardziej miękkiego podłoża. Ostatnie badania dotyczą elastycznych, a jednocześnie twardych powłok ceramicznych wytworzonych metodą rozpylania magnetronowego. Wśród nich dwuborki wolframu reprezentują nową klasę powłok, które są jednocześnie supertwarde, wytrzymałe i odporne na pękanie. Domieszkowanie WB_x metalem przejściowym, takim jak tytan, cyrkon lub tantal, prowadzi do znacznej poprawy właściwości mechanicznych i trybologicznych w porównaniu z borkami niedomieszkowanymi. W tym projekcie szczególne właściwości mechaniczne powłok W-TM-B zostaną uzyskane dzięki zastosowaniu rozpylania magnetronowego z użyciem impulsów o dużej mocy (HIPIMS), które zapewnia odpowiedni bilans energii na osadzonej powierzchni. Ze względu na to, że materiał i sposób jego nanoszenia są nowe, brakuje badań dotyczących właściwości mechanicznych takich powłok lub są one niewystarczające. **W ramach tego projektu kompleksowa analiza numeryczna i eksperymentalna umożliwi nam zbadanie w różnych skalach właściwości mechanicznych i adhezji nowatorskich powłok z trójskładnikowych borków wolframu osadzanych metodą HIPIMS.**



W projekcie, będzie przeprowadzone opracowywanie, implementacja i walidacja modeli numerycznych przewidujących właściwości mechaniczne i zachowanie w trakcie obciążania aż do uszkodzenia powłok w różnych skalach (atomowej, mikroskopowej i makroskopowej).

Rys 1: Schemat proponowanego modelu wieloskalowego

Obecny stan wiedzy wskazuje na konieczność prowadzenia badań w kierunku lepszego zrozumienia zależności między mikrostrukturą a właściwościami mechanicznymi materiałów w różnych skalach. Tak dużej liczby efektów materiałowych występujących w kilku skalach podczas obciążania powłok nie można kompleksowo opisać za pomocą podejścia jednoskalowego. Jako podstawę wykorzystana zostanie teoria funkcjonalu gęstości (DFT) i dynamika molekularna (MD) do uzyskania podstawowych właściwości mechanicznych w skali atomowej. Makroskopowe właściwości mechaniczne W-TM-B mogą wynikać również z efektów materiałowych występujących również w skali mikroskopowej. Właściwości borków zależą od rodzaju struktury (kształt „V” lub ziarna prostopadłe do podłoża), wielkości ziarna (efekt Halla-Petcha), stopnia amortyzacji i rozmieszczenia drugiej fazy borkowej w powłoce. Może to być zamodelowane za pomocą metody elementów dyskretnych i/lub metody mikroelementów skończonych. Ponadto rodzaj wiązania determinuje cechy powłoki ceramicznej, a tym samym właściwości samej granicy powłoka-podłoże. Analiza przebiegać będzie od poziomu wiązania (model atomistyczny) poprzez rozdział międzyfazowy (DEM) i pękania w mikroskali (FEM) do odporności na uszkodzenia w skali makro. W rezultacie zostanie zamodelowany test przyczepności warstwy z użyciem ablacji laserowej (eng. Laser Spallation Test). Modele numeryczne zostaną zwalidowane na podstawie danych uzyskanych w ramach własnych wieloskalowych badań eksperymentalnych. Badania eksperymentalne będą obejmować m.in. nowatorskie metody wytrzymałości mechanicznej, takie jak: ściskanie nanokolumn, zginanie mikrobelk, nanoidentacje i mikrotesty rozciągania. Ponadto zbadane zostaną także: odporność termiczna, odporność na ścieranie oraz inne własności użytkowe naniesionych warstw.

Proponowany interdyscyplinarny projekt skupia się na (i) opracowaniu metod wydajnego wytwarzania materiałów supertwardych i elastycznych oraz ich osadzania w postaci powłok o wysokiej przyczepności. Osadzone powłoki i powierzchnie styku powłoka-podłoże będą następnie (ii) badane teoretycznie i eksperymentalnie pod kątem ich właściwości mechanicznych i zachowania odkształceń (aż do uszkodzenia) w wielu skalach. Zaproponowane modele teoretyczne i metody eksperymentalne będą również (iii) badane z perspektywy przyszłych zastosowań powłok W-TM-B, szczególnie w obróbce wysokotemperaturowej. Mając na uwadze możliwości zastosowania przemysłowego, odporność na pękanie, elastyczność i przyczepność to najważniejsze własności w kontekście trwałości i długookresowego działania pokrywanych narzędzi. Dlatego konieczne jest stworzenie wieloskalowego modelu opisującego właściwości osadzanych warstw, a także układu powłoka-podłoże.