

Instytut Matematyki
Uniwersytetu Humanistyczno-Przyrodniczego
Jana Kochanowskiego w Kielcach

RAPORT KOŃCOWY

za okres: 01.07.2009-31.12.2013

Zadanie 3

Opracowanie i realizacja symulacji zjawisk fizycznych w obszarze warstw węglowo-palladowych wytworzonych w ramach zadania 1

Podzadanie 3.1 Metoda elementów skończonych

Opracowała: mgr Joanna Rymarczyk

1. Opis i cel zadania

Celem zadania było opracowanie i realizacja symulacji zjawisk fizycznych w obszarze warstw węglowo-palladowych (warstw C-Pd) wytwarzanych metodą PVD. Ze względu na złożoność i trudność rozwiązania równań w skali „nano” wyprowadzono równania makroskopowe, które pozwoliły na uproszczenie obliczeń bez utraty dokładności rozwiązania. Do badań właściwości sprężysto-plastycznych (trybologicznych), termicznych i elektrycznych warstw C-Pd zastosowano metodą elementów skończonych (MES).

2. Opis merytoryczny wykonanych prac

KM1 Wyprowadzenie równań makroskopowych ze znajomości mikrostruktury i interpolacja równań do skali nanometrycznej

W obliczeniach założono, że badany układ jest ośrodkiem ciągłym, a jego właściwości można zapisać fenomenologicznymi równaniami, które można rozwiązać numerycznie lub analitycznie. Podejście takie wymagało wprowadzenia danych wejściowych z doświadczenia lub z innych metod obliczeniowych. Zastosowane procedury numeryczne pozwoliły na wizualizację problemu.

KM2 Modelowanie zjawisk termicznych i mechanicznych w nanostrukturalnych warstwach węglowych

W pierwszym etapie prac wykonano symulację MES badania właściwości nanomechanicznych warstw C-Pd metodą nanoindentacji. Przeprowadzone obliczenia na kilku modelach warstw o różnej zawartości palladu. Właściwości materiałowe warstw C-Pd przed symulacją badania nanoindentacji zostały określone metodą homogenizacji periodycznej (homogenizując 'elasticity tensor'). Badano również wpływ morfologii warstw, budowy ziarnistej warstw C-Pd na jej właściwości nanomechaniczne przyjmując dane początkowe materiałów makroskopowych.

Wyniki obliczeń dostarczyły wiedzy na temat sprężystość i plastyczność nanostrukturalnych warstwy C-Pd. W zależności od składu warstwy C-Pd obserwujemy zmianę jej właściwości nanomechanicznych. Otrzymane w wyniku obliczeń wykresy odkształcenia materiału w funkcji obciążenia obrazują sprężysto-plastyczny charakter

materiału. Skład warstw C-Pd (zawartość procentowa Pd) wpływa na jej właściwości mechaniczne i kształt krzywej. Większa zawartość procentowa Pd w warstwie sprawia, że warstwa jest mniej plastyczna, mniejsze jest jej odkształcenie po odciążeniu, czyli materiał ma charakter bardziej sprężysty.

W następnych etapach prac wykonano symulację wieloskalową właściwości termicznych nanomateriałów. Wykorzystując równanie różniczkowe cząstkowe przewodnictwa cieplnego opisano przepływ ciepła przy zadanym jego początkowym rozkładzie w ośrodku oraz przy określonych warunkach brzegowych takich jak temperatura początkowa, gęstość strumienia ciepła, strumień ciepła (siła węzłowa), prawo konwekcji Newtona, radiacja.

Badania wykazały, że właściwości cieplne warstw zależą od właściwości termicznych matrycy i nanocząsteczek wbudowanych w matrycę oraz od kształtu i rozmiaru nanocząsteczek palladu, sposobu przestrzennego rozmieszczenia ich w węglowej matrycy, powierzchni właściwej oraz energii powierzchniowej.

KM3 Modelowanie zjawisk fizycznych w warstwach w funkcji temperatury

Wykonano badania symulacyjne powierzchniowych naprężeń wywołanych zmianą temperatury otoczenia warstwy C-Pd. Badania wykazały, że najbardziej sprzyjającą pękaniu termicznemu jest składowa poprzeczna, w wyniku działania, której następuje rozdzielanie materiału (przemieszczenie ziaren w węglowej matrycy) w kierunku przesuwania się strumienia ciepła. W miejscu występowania palladu deformacja następuje szybciej, co może prowadzić do powstania deformacji warstwy na powierzchni lub odrywania się warstwy od podłoża.

KM5 Modelowanie zjawisk fizycznych w warstwach uzyskanych z procesów PVD

Metodę elementów skończonych wykorzystano także do modelowania takiego zjawiska fizycznego jak badanie zmiany natężenia prądu płynącego przez warstwę C-Pd w zależności od zmiennego napięcia zasilającego. Do obliczeń właściwości elektrycznych warstw nanokompozytowych C-Pd przyjęto dane eksperymentalne.

Z obliczeń MES właściwości elektrycznych warstw C-Pd wynika, że dla dwóch warstw o tej samej ilości Pd względem C, ale innym rozkładzie i innej wielkości ziaren otrzymano te same wartości natężenia prądu. Wielkość i rozkład skupisk ziaren palladowych wpływa jednak jakościowo na właściwości elektryczne warstwy. Większe zagęszczenie palladu w warstwie powoduje zbliżenie ziaren, dzięki czemu możliwe jest powstawanie ścieżek przepływu prądu.

3. Opis osiągniętych rezultatów (publikacje, urządzenia, elementy urządzeń, założenia techniczne do projektu, projekt urządzenia)

Publikacje:

- 1) J.Rymarczyk, E. Czerwosz, A. Richter, FEM modelling of nanoindentation experiment for nanostructural Me-carbon film (Me = Pd, Ni), Proc. of SPIE, Vol. 7502, 750224 (2009);
- 2) J.Rymarczyk, M.Kozłowski, E.Czerwosz, Metoda elementów skończonych (MES) w zastosowaniu do nanokrystalicznych warstw węglowo-palladowych otrzymywanych metodą PVD, Elektronika1, s.18-21, (2009);
- 3) J.Rymarczyk, P.Kowalczyk, E.Czerwosz and W.Bielski, Numerical modeling of mechanical properties of C-Pd film by homogenization technique and Finite Element Method, Proc. of ICNAAM, (2011);
- 4) W.Bielski, A.Idzik, P.Kowalczyk, E.Czerwosz, and J.Rymarczyk, Numerical modelling of electric current flow in nanocrystalline 2D carbon-palladium structures via homogenization method, AIP Conference Proceedings 1558, 2193 (2013);

Udział w konferencjach naukowych:

- 1) XXIVth IEEE-SPIE Symposium, Wilga 26-30.05.2009.
- 2) 5th Wide Bandgap Materials, 7th Diamond & Related Films and 2nd International Workshop on Science and Applications of Nanoscale Diamond Materials, Zakopane 28.06. – 2.07.2010.
- 3) ICNAAM 2011, *9th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics*, Halkidiki, Grecja, 18-25.09.2011.