



EduAkademia.pl

prace naukowe na zlecenie

Praca-licencjacka-chomikuj-32

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

PRACA DYPLMOWA MAGISTERSKA

pt.

„Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych.”

Imię i nazwisko dyplomanta:

Kierunek studiów:

Specjalność:

Nr albumu:

Promotor:

Recenzent:

Rafał Kot
Informatyka Stosowana
Modelowanie i Technologie Informacyjne

126425
dr Magdalena Kopernik
prof. dr hab. inż. Jacek Rońda

Podpis dyplomanta: Podpis promotora:

Kraków 2010

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Spis treści

Wykaz najważniejszych oznaczeń

4

Skróty

.....
4

Lista symboli

6

1.

Wstęp

.....
7

2.

Wybrane zagadnienia inżynierii materiałowej

9

2.1

Nanomateriały

9

2.2

Materiały o własnościach gradientowych

12

3.

Wybrane problemy wzrostu warstw nanometrycznych

14

3.1

Doświadczalne metody wytwarzania warstw nanometrycznych

14

3.2

Mechanizmy wzrostu

16

3.3

Typy wzrostu

19

4.

Modelowanie wzrostu

21

4.1

Modelowanie wieloskalowe

21

4.2

Automaty komórkowe

23

4.3	
Metoda elementów skończonych	
25	
4.4	
Modele wzrostu	
26	
5.	
Cel pracy	
27	
6.	
Model	
.....	
29	
6.1	
Model automatu komórkowego	
30	
6.1.1	
Określenie siatki obliczeniowej	
30	

2

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

6.1.2	
Określenie zmiennych stanu	
31	

6.1.3	
Określenie dodatkowych zmiennych wewnętrznych	
32	

6.1.4

Określenie rodzaju sąsiedztwa	33
6.1.5	
Zdefiniowanie reguł zmian stanu	33
6.2	
Model nanoszenia przypadkowego	35
6.3	
Model lokalnego minimum	36
6.4	
Model probabilistyczny	39
7	
Wyniki	45
7.1	
Charakterystyka powierzchni	46
7.1.1	
Porównanie geometrii warstwy dla opracowanych modeli	46
7.1.2	
Model probabilistyczny – symulacje dla różnych danych wejściowych	50
7.2	

Symulacja spęczania – porównanie	52
7.3	
Dyskusja	58
8	
Podsumowanie i wnioski	60
9	
Implementacja modelu	62
9.1	
Środowisko	62
9.2	
Struktura wewnętrzna aplikacji	63
9.3 GUI	71
71	
Spis rysunków	73
73	
Bibliografia	76
76	

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Wykaz najważniejszych oznaczeń

Skróty

FGM – materiały gradientowe (ang. Functionally Gradient Materials)

RHEED - metoda dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów (ang. Reflection High-Energy Electron Diffraction)

MBE – epitaksja z wiązki molekularnej (ang. Molecular Beam Epitaxy)

UHV – bardzo wysoka próżnia (ang. Ultra High Vacuum)

CA – automaty komórkowe (ang. Cellular Automata)

MC – Monte Carlo

MD – metoda dynamiki molekularnej (ang. Molecular Dynamics)

MES – metoda elementów skończonych (ang. Finite Element Method)

CAFE – metoda połączenia MES i automatów komórkowych (ang. Cellular Automata in Finite Element)

MNP – model nanoszenia przypadkowego

MLM – model lokalnego minimum

MP – model probabilistyczny

C++ ISO/ANSI – standard języka C++ (pot. C++ natywny)

.NET – dokładnie .NET Framework, platforma programistyczna opracowana przez Microsoft, obejmująca środowisko uruchomieniowe CLR oraz biblioteki klas.

C++/CLI – standard języka C++ opracowany przez firmę Microsoft dla platformy programistycznej .NET (ang. Common Language Infrastructure)

CLR – środowisko do wykonywania programów platformy .NET (ang. Common Language RunTime)

4

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Bmp – format pliku z grafiką bitmapową

Msh – format pliku używany do obliczeń MES

GUI – graficzny interfejs użytkownika (ang. Graphical User Interface)

5

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Lista Symboli

c – pojedyncza komórka siatki

C – zbiór komórek siatki

D – wymiar siatki automatu komórkowego

f – funkcja przejścia

L – siatka automatu komórkowego

N – zbiór sąsiadów komórki c

P_i – prawdopodobieństwo lokalne ruchu komórek R – promień otoczenia Moore'a komórki c

s – stan pojedynczej komórki c

S – zbiór stanów komórki c

t – chwila czasowa

T – relaksacja, współczynnik temperaturowy

x – szerokość nanopowłoki (ilość wierszy automatu)

y – wysokość nanopowłoki (ilość kolumn automatu)

$h(i)$ – wysokość warstwy (wysokość kolumn komórek aktywnych)

$cszer$ – wysokość i szerokość cząstki (komórki)

η – zmienna materiałowa

θ – stopień napyłania

Wstęp

Od początku XXI wieku dzieli nas już prawie dekada. Czas ten pokazał jak wiele nowych problemów i wyzwań niesie nam nadchodzący okres. Rozwój nauki i techniki, wzrost konsumpcji oraz kurcząca się w zastraszającym tempie baza surowcowa wymusiły trend dążenia do miniaturyzacji i minimalizacji. By uzyskać taki efekt zmusza się współczesnych inżynierów – konstruktorów do stosowania coraz to bardziej zaawansowanych materiałów, które dzięki rozszerzonej funkcjonalności będą lepiej spełniać wymagania związane z ich przeznaczeniem.

Do wprowadzenia nowych generacji materiałów o określonych własnościach, niezbędne jest poznanie zachowania się materiału począwszy od skali nanostrukturalnej przez mikrostrukturę do skali makroskopowej. Opisem takich zachowań zajmuje się nowoczesna inżynieria materiałowa, nauka która podobnie do nauk informatycznych oraz awangardowych nauk biologicznych i medycznych, należy do najintensywniej rozwijających się obszarów nauki, decydujących obecnie o postępie cywilizacyjnym ludzkości.

Projektowanie nowych materiałów, w szczególności materiałów o strukturze nanometrycznej jest procesem bardzo złożonym i skomplikowanym, wykorzystującym bardzo zaawansowane metody i technologie. Nie można wyobrazić sobie pracy przy modelowaniu materiału bez użycia narzędzia jakim są symulacje komputerowe. Choć wykorzystuje się zagadnienia poznane już dziesiątki lat temu, teraz w dobie superkomputerów nabierają one nowego, szerszego znaczenia. Metodą, która przez kilkadziesiąt lat pozostawała tylko teorią, jest szeroko już teraz wykorzystywana

7

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

metoda Automatów Komórkowych. Technika ta w połączeniu z Metodą Elementów Skończonych stwarza narzędzie, dzięki któremu można na niespotykaną dotąd skalę opisywać materiał i poznawać zjawiska w nim zachodzące na wielu poziomach jednocześnie. Dzięki takiemu rozwojowi technologii alternatywnych, można tworzyć materiały o funkcjonalności i skali dotychczas niemożliwej do uzyskania.

Niniejsza praca przedstawia próbę stworzenia narzędzia obliczeniowego, opisującego zagadnienie z zakresu

fizyki i inżynierii materiałowej jakim jest wzrost warstw na poziomie atomowym. Ponieważ autor skupił się głównie na idei modelowania wieloskalowego, a w szczególności na interpretacji metody automatów komórkowych, koncentruje się on tylko na kilku dominujących procesach wzrostu.

Rozdział 2

Wybrane zagadnienia inżynierii materiałowej

W rozdziale tym przedstawiono wybrane zagadnienia związane z modelowaniem wzrostu warstw w procesie powstawania nanopowłok. Mimo faktu, że nauka o nanomateriałach jest dziedziną, której szczególnie bogaty rozkwit przypada na ostatnią dekadę, tematyka tego zagadnienia jest bardzo rozległa, co przekłada się na istnienie obszernej literatury. Szczególną uwagę poświęcono wprowadzeniu obowiązujących definicji i przyjętej terminologii. W niniejszym rozdziale omówiono tylko najbardziej istotne zagadnienia, które według autora mają istotny wpływ na zrozumienie tematu. W podrozdziale 2.1 dokonano opisu nanomateriałów i technik związanych z ich projektowaniem oraz klasyfikacją. Natomiast w podrozdziale 2.2 została przedstawiona koncepcja łączenia nanomateriałów dająca materiałowi strukturę gradientową.

2.1 Nanomateriały

Zgodnie z definicją wprowadzoną w pracy [1], nauka o nanomateriałach zajmuje się klasą materiałów, zbudowanych ze struktur lub elementów posiadających w przynajmniej jednym kierunku rozmiary w granicach do 100 nanometrów. Poznanie tej dziedziny pozwala na precyzyjnie manipulowanie materią w skali pojedynczych atomów i molekuł. Właściwości takich materiałów często bywają bardzo odmienne od cechy danej substancji o większych rozmiarach ziaren. Zmniejszenie rozmiaru materiału

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

może następować w różnych kierunkach, prowadzi to do naturalnego podziału nanostruktur ze względu na liczbę wymiarów, względem których wielkość mierzy się w nanometrach. Jako cztery główne grupy wymieniamy nanomateriały :

- a) zerowymiarowe (nanomateriały punktowe)
- b) jednowymiarowe (nanopłytki, materiały wielowarstwowe, ultra cienkie warstwy)
- c) dwuwymiarowe (nanorurki, nanopręty, nanodruty, nanowłókna)
- d) trójwymiarowe (nanocząstki, mezopory).

Szczególnie interesujące autora nanopowłoki zaliczamy do grupy nanomateriałów jednowymiarowych jako cienkie warstwy lub układy wielowarstwowe. W pracy [2] przedstawiony jest szereg zastosowań takich materiałów, które mają coraz większy udział szczególnie w technice, a zwłaszcza w mikroelektronice oraz optyce i medycynie.

Warstwy nanoszone na materiał pełnią różną rolę w zależności od przeznaczenia danego elementu. W niektórych przypadkach mogą pełnić rolę ochronną podłoża, co umożliwia zwiększenie żywotności materiałów w dotychczasowym ich zastosowaniu. Natomiast układy wielowarstwowe mogą pełnić również rolę materiałów gradientowych o bardzo ukierunkowanych i specyficznych własnościach. Materiałom nanostrukturalnym o własnościach gradientowych zostanie poświęcony podrozdział 2.2. W tej części pracy należałoby również nadmienić, że w nanomateriałach jednym z popularniejszych sposobów otrzymywania gradientu jest odpowiednie nanoszenie warstw o zadanym składzie. Metod pokrywania materiałów nanowarstwami istnieje bardzo wiele, jednak prawie wszystkie opierają się o dwa skrajnie odmienne podejścia : top-down oraz bottom-up, które są przedstawione w pracach [1,3]. Na rysunku 1, możemy zobaczyć, że pomimo iż metody mogą być skrajnie odmienne to prowadzą do tego samego efektu.

Procesy top-down opierają się w głównej mierze na podziale materiału makroskopowego na mniejsze części lub też na miniaturyzacji procesu tworzenia się ciała stałego. Jednym z najważniejszych procesów tego typu jest wysokoenergetyczne mielenie proszków o grubych ziarnach. Jest to metoda, którą stosuje się na szeroką skalę do produkcji nanomateriałów metalicznych.

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 1 Ilustracja powstawania nanostruktur metodami top-down i bottom-up

(opracowane na podstawie [1])

Bardzo popularne są również metody litograficzne gdzie nanostruktura może powstawać w procesach trawienia chemicznego, trawienia plazmowego czy domieszkowania z użyciem implantacji jonów.

W procesach bottom-up dzięki zjawiskom samoorganizacji polegającej na wykorzystaniu sił natury fizycznej lub chemicznej tworzy się materiały dzięki kontrolowanemu układaniu warstw atom po atomie. W metodach tych budulcem nanostruktur mogą być atomy, molekuły czy nawet nanocząstki. Zmieniając wielkość

budulca oraz kontrolując cechy jego powierzchni, a narzucając przy tym konkretne warunki łączenia się w nanomateriałach można otrzymać oczekiwane własności. Procesy bottom-up można przyporządkować do jednej z dwóch grup : wykorzystujące syntezę chemiczną lub oparte o kontrolowane osadzanie i wzrost materiałów. W rozdziale 3 autor przedstawi jedną z metod doświadczalnych opartą na drugiej grupie procesów, czyli wykorzystujących kontrolowane osadzanie. Będzie to metoda, która posłuży nam do zaprojektowania modelu układu składającego się z wielu nanopowłok. Jednakże, aby wprowadzić czytelnika w całość zagadnienia związanego tą pracą autor

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

przedstawi jeszcze w podrozdziale 2.2 koncepcje projektowania materiałów rozszerzonej funkcjonalności zwanych materiałami gradientowymi. Jest to bardzo ważne, ponieważ w zależności od metody przy sposobie nanoszenia powstaje określony gradient struktury, który powoduje, że zmiana własności między kolejnymi powłokami zachodzi w sposób ciągły.

2.2 Materiały o własnościach gradientowych

Idea materiałów gradientowych nie jest nowa i nie jest to wytwór współczesnej inżynierii materiałowej. Zjawisko to znane jest w przyrodzie od bardzo dawna. U niektórych roślin struktura łodygi zmienia się w sposób ciągły co zapewnia jej niezwykłą giętkość i wytrzymałość. Również nowoczesna inżynieria materiałowa dąży do tworzenia materiałów kompletnych mających szeroki zakres własności w wielu odmiennych kierunkach.

Gradientem danej właściwości materiału nazywamy jej systematyczną zmianę obserwowaną wzdłuż kierunku decydującego o zachowaniu się materiału podczas eksploatacji. Powtarzalność tych zmian wskazuje, że modyfikacja cech następuje w sposób ciągły w funkcji położenia [4]. Na rysunku 2 zostało przedstawione porównanie materiałów połączonych klasycznie z materiałami, u których występuje gradient na granicy. Jak możemy zauważyć w klasycznym podejściu zmiana prawie wszystkich własności następuje na granicy w sposób skokowy, co jest bardzo niekorzystne w użytkowaniu danego materiału. Połączenie takie może prowadzić do różnego rodzaju defektów i pęknięć. Natomiast dla materiałów gradientowych własności zmieniają się w sposób ciągły i nie występują drastyczne zmiany właściwości na granicach.

W pracy [5] opisano, że realizację powyższego podejścia można uzyskać dzięki zmianie w funkcji położenia następujących wielkości:

- a) składu chemicznego,
- b) wielkości ziarna
- c) mikrostruktury lub uporządkowania atomowego

W projektowaniu FGM szczególną uwagę należy zwrócić na zasięg gradientu. Możemy tu wyróżnić podejście, w którym gradient występuje w obszarze powierzchni zewnętrznej materiału oraz gdzie rozciąga się on wzdłuż całego przekroju.

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 2 Zmiany własności w klasycznie połączonych materiałach

i materiałach gradientowych (opracowane na podstawie [4])

Welementach, które mają zapewnić optymalną reakcję materiału na działanie bodźca

zewnętrznego, a w szczególności na zmianę temperatury czy naprężeń gradient istnieje

w całym przekroju. W przypadku komponentów powstałych na bazie połączenia dwóch materiałów, czego przykładem mogą być powłoki ochronne gradient jest zlokalizowany w okolicy granicy rozdziałów.

W pracach [4,6] autorzy wykazują, że koncepcja projektowania funkcjonalnych materiałów gradientowych nie jest podejściem zarezerwowanym tylko dla konkretnej grupy materiałów, lecz jest kierunkiem o szerokich możliwościach stosowanym dla różnych rodzajów materiałów oraz dla różnych skal konstrukcji. Jednakże sam proces technologiczny wytwarzania FGM jest zależny od rodzaju, kształtu, rozmiaru czy wartości gradientu zmian własności materiałowych. Szczególnie interesującym autora tej pracy procesem powstawania struktury gradientowej są te grupy metod, w których gradient powstaje przez nakładanie warstw, jedna po drugiej. Takie podejście autor wykorzysta przy tworzeniu modelu materiału składającego z wielu warstw o grubości rzędu nanometrów i o własnościach gradientowych.

Rozdział 3

Wybrane problemy wzrostu warstw nanometrycznych

Rozdział ten jest poświęcony wprowadzeniu do zagadnienia opisującego mechanizmy zachodzące na powierzchni tworzącej się nanopowłoki. W pierwszej części tego rozdziału zostanie przedstawiona technika nanoszenia nanowarstw zwana epitaksją z wiązki molekularnej. Metoda ta posłużyła autorowi do analizy i klasyfikacji procesów, które mają najistotniejszy wpływ na geometrie powstającej warstwy. Procesy te zostaną wyszczególnione i opisane w kolejnej części pracy, gdzie również zostaną przedstawione główne typy wzrostu warstw.

3.1 Doświadczalne metody wytwarzania warstw nanometrycznych

Epitaksja z wiązki molekularnej jest nowoczesną technologią otrzymywania cienkich warstw w sposób kontrolowany. Według tej metody cienkie warstwy krystalizują wskutek reakcji pomiędzy wiązkami molekularnymi lub atomowymi składników wytwarzanego materiału, a powierzchnią podłoża,

utrzymywanego w odpowiednich warunkach [1].

Urządzenie wykorzystywane w tym celu to bardzo zaawansowany reaktor z wbudowanymi mechanizmami do kontroli wzrostu. Reaktor zawiera m. in. komorę

14

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

pró żniową, w której panują warunki bardzo wysokiej pró żni rzędu $5 \cdot 10^{-10}$ Pa. Źródłem wi ązek molekularnych są komórki efuzyjne, których wylot skierowany jest w stronę podgrzanego podłoża, jakim jest cienka płytka o grubości rzędu 0,5 mm. Uproszczony schemat takiego urządzenia jest przedstawiony na rysunku nr 3.

Rysunek 3 Schemat reaktora wykorzystywanego w metodzie MBE (opracowane na podstawie [1])

Wnajczęściej stosowanym standardzie techniki MBE, wykorzystywane są komórki efuzyjne Knudsen.

Znajdują się tam pierwiastki w stanie stałym i o bardzo wysokiej czystości. Podczas procesu nanoszenia komórki są podgrzewane do wysokiej temperatury, co powoduje że znajdujący się tam materiał sublimuje dając wiązkę

atomów. Odpowiednie komórki efuzyjne mogą być otwierane bądź zamykane, dzięki czemu otrzymuje się powierzchnię o zadanym składzie. Ponadto obracające się podłoże zapewnia równomierny wzrost powierzchni, a to wraz z możliwością precyzyjnego kontrolowania składu nanoszonej struktury stanowi najistotniejsze zalety technologii MBE.

Wtworzeniu komputerowego modelu wzrostu warstw o wielkościach rzędu nanometrów istotne było zaadaptowanie metody lub grupy metod, które wykreują

pewne zjawiska odgrywające kluczową rolę w powstawaniu powłoki.

15

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

3.2 Mechanizmy wzrostu

Zjawiska zachodzące w skali atomowej z racji swojego wymiaru mają szczególny charakter. Poznanie i opisanie tych procesów jest ważne by lepiej zrozumieć ogólny zachowanie materiału. Wykorzystana w tym celu metoda epitaksji z wiązki molekularnej przybliża nam sposób zachowania się cząstek od strony zjawisk fizycznych.

Literatura [1,7,8] wprowadza podział procesu epitaksjalnego na dwa główne

etapy: formowania się wiązki molekularnej i transportu oraz wzrostu powierzchniowego. Pierwsza grupa procesów jest dla autora tej pracy mniej interesująca, ponieważ nanoszenie cząstek odbywa się w warunkach UHV, dlatego można przyjąć, że całość substancji, która uległa sublimacji w komórkach efuzyjnych dociera do powierzchni i osadza się na niej. Nie mają na to wpływu wzajemne oddziaływania między cząsteczkami lub ich wpływ jest mały. Przyjęcie takiego założenia upraszcza zagadnienie lecz dla symulacji wzrostu nie jest zaniedbaniem istotnym. Fazę transportu cząstek przedstawia rysunek nr 4.

Rysunek 4 Transport cząstek na powierzchni (opracowane na podstawie [9])

Widzimy na nim, że cząsteczki, które są budulcem nanopowłok transportowane są na powierzchni wręcz w drastycznie regularny sposób. Nie odzwierciedla to oczywiście w pełni rzeczywistości, gdzie faza transportu jest procesem bardzo złożonym, lecz pokazuje równomierność osadzania się budulca.

16

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Na rysunku 5 jest przedstawiona grupa procesów szczególnie nas interesujących – procesy powierzchniowe.

Rysunek 5 Procesy powierzchniowe

Do najważniejszych z nich możemy zaliczyć[7]:

a) adsorpcję,

b) dyfuzję powierzchniową,

c)interdyfuzję,

d)nukleację,

e)desorpcję.

Adsorpcja

Adsorpcja jest procesem przyłączania cząstek z wiązki molekularnej przez rosnącą warstwę. Na proces ten składa się kilka charakterystycznych etapów. Pierwszym z nich jest termiczna akomodacja. Cząstka zbliżająca się do podłoża posiada nadmiarową energię kinetyczną, którą jeżeli straci to nastąpi jej osadzenie na powierzchni. Natomiast jeżeli nie nastąpi strata energii, to kontakt z podłożem zakończy się sprężystym odbiciem.

Dyfuzję powierzchniową

Cząstka, której udało się już dotrzeć na powierzchnię zostaje z nią powiązana siłami o charakterze fizycznym (słabe wiązania typu Van der Waalsa) lub o charakterze chemicznym. Jeżeli ułożona cząstka, wiąże się w sposób trwały tylko z podłożem

17

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

słabymi wiązaniami van der Waalsa, to może dyfundować po powierzchni. Taka migracja cząstki jest jednak uzależniona od energii, którą posiada. Mobilność taką uzyskuje się po przez utrzymywanie w czasie procesu nanoszenia odpowiednio wysokiej temperatury. Im wyższa temperatura tym większa mobilność cząstek, które w niektórych przypadkach potrafią zrywać utworzone wiązania z innymi cząstkami, czy przeskakiwać bariery jakie napotykają przy dochodzeniu do krawędzi warstwy. Pokonanie tej przeszkody jest kluczowym procesem dla wzrostu warstwy. Proces ten czasem jest blokowany przy niskich temperaturach, co determinuje typ wzrostu.

Nukleacja

Cząstki dyfundujące po powierzchni napotykają inne pojedyncze cząstki w wyniku czego mogą się z nimi połączyć tworząc zarodek nowej warstwy. Ponadto mogą przyłączać się do innych zarodków tworząc podwaliny nowej warstwy. Proces ten nazywa się nukleacją. Na rysunku nr 7 możemy zauważyć jak dyfundujące cząstki przyłączają się do większych zarodków.

Rysunek 6 Dyfuzja cząstek po powierzchni (3D)

Utrzymywanie odpowiednio wysokiej temperatury, może być powodem odrywania się cząstek od małych zarodków i ich przyłączanie się do dużych, a także przypadkowej migracji całych wysp, które również mogą się ze sobą łączyć. Migracja i zarodkowanie uwarunkowuje różne typy wzrostu warstw. Podstawowe typy wzrostu przedstawione w literaturze [5] zostaną omówione w następnym podrozdziale.

18

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Desorpcja

Proces desorpcji cząstek w metodzie epitaksji z wiązki molekularnej jest w porównaniu z adsorpcją zaniedbywalnie mały. Dyfundujące cząstki mogą odrywać się nie tylko od innych cząstek, ale także od podłoża. Gdy proces ten wielkościami jest równy adsorpcji, to mówimy wtedy o stanie równowagi, kiedy kolejne warstwy nie wzrastają. Jednak w metodzie epitaksjalnej przyjmujemy, że desorpcja jest liczebnie o kilka rzędów wielkości mniejszą od adsorpcji.

3.3 Typy wzrostu

W zależności od warunków panujących podczas nanoszenia warstw zauważa się przejścia między różnymi typami wzrostu. Przez typ wzrostu rozumiemy sposób w jaki osadzone cząstki łączą się z innymi cząstkami oraz z podłożem. Jest to zjawisko charakterystyczne dla powstawania warstw epitaksjalnych. Pośrednio

parametrem, który wpływa na ten proces jest temperatura. W literaturze [7] wymienione są trzy główne typy.

Pierwszym z nich jest wzrost warstwowy (Frank van der Merve – 2D). Kolejne warstwy powstają jedna po drugiej. Powstająca warstwa charakteryzuje się bardzo małą chropowatością. Dzieje się tak, gdy proces wzrostu przeprowadza się w wysokich

Rysunek 7 Wzrost warstwowy (opracowane na podstawie [9])

temperaturach. Cząstki są na tyle mobilne, że może dochodzić do zerwania wiązań, przez co dyfuzja zachodzi bardzo szybko. Przedstawioną sytuację pokazuje rysunek 7.

Kolejnym typem jest wzrost wyspowy (Volmer-Weber - 3D) przedstawiony na rysunku 8. Cząstki osadzając się na powierzchni, silniej wiążą się ze sobą niż z podłożem. Proces zachodzi w niskiej temperaturze, a co za tym idzie dyfuzja powierzchniowa jest bardzo wolna. Powoduje to wzrost izolowanych wysp.

19

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 8 Wzrost wyspowy (opracowane na podstawie [9])

Rysunek 9 przedstawia wzrost pośredni (Stranski – Krastanov), który zachodzi dla umiarkowanych temperatur. W pierwszym stadium wzrostu tworzona jest monowarstwa, a następnie na takim podłożu powstają wyspy.

Rysunek 9 Wzrost pośredni (opracowane na podstawie [9])

Opisane typy wzrostu, pokazują jak zmienia się morfologia powstającej powierzchni w zależności od różnych parametrów. Jako parametr wymienia się głównie czynnik temperaturowy. Jest to założenie słuszne, ale nie jedyne. Na poziomie szczególności niniejszej pracy powinno być wystarczające.

Rozdział 4

Modelowanie wzrostu

Przedstawione w poprzednim rozdziale procesy zachodzące przy tworzeniu nanometariałów sprawiają, że co raz większym zainteresowaniem cieszą się techniki, które prowadzą do ich szerszego poznania. Rozdział ten zostanie poświęcony wprowadzeniu do modelowania wieloskalowego i do tych metod, które łączą w sobie to podejście. Szczególnie dokładnie zostanie omówiona metoda automatów komórkowych i elementów skończonych. Natomiast w podrozdziale 4.4 zostanie przedstawione wprowadzenie do literaturowych modeli wzrostu.

4.1 Modelowanie wieloskalowe

Modelowanie nanometariałów w odróżnieniu od tradycyjnych metod musi uwzględniać nie tylko opis makroskopowy ale również to co dzieje się w skali nano i mikro. Ideą takiego podejścia jest modelowanie wieloskalowe. Technika ta pozwala rozwijać opis zachowania się materiału w wielu skalach. Autor wprowadzając nas w tematykę wzrostu warstw rzędu nanometrów pokazał nam jak ważne i elementarne procesy zachodzą na tym poziomie i jak istotny wpływ mają one na rozwój nowoczesnych materiałów. Dokładne poznanie takich zjawisk wiąże się z integracją modeli matematycznych od skali atomowej do modeli charakteryzujących się znacznym stopniem uśrednienia oraz wprowadzeniem technik, które bazując na tradycyjnych metodach rozwijają podejście wieloskalowe. Możliwości takie dają dynamicznie rozwijające się w ostatnich latach metody obliczeniowe takie jak Automaty

21

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Komórkowe, metoda Monte Carlo czy Metoda Dynamiki Molekularnej [11,12] Techniki te znane są w matematyce od kilkudziesięciu lat i służą opisowi zagadnień w wielu dziedzinach. Wprowadzenie ich w inżynierię materiałową wyposażało inżynierów w dodatkowe narzędzie do opisu materiału.

Modele wieloskalowe możemy podzielić na dwie grupy: modele hierarchiczne oraz hybrydowe.

Rysunek 10 Modele hierarchiczne i hybrydowe (opracowane na podstawie [13])

Obie metody wykorzystują w ogólnym podejściu albo modele konwencjonalne albo alternatywne (np. Automaty w połączeniu z MEdem). W klasie hierarchicznej modele

wskali wyższej budowane są częściowo na podstawie obserwacji i wyników z niższego bardziej elementarnego poziomu. Natomiast rozwiązania skali makro stanowią

warunki brzegowe dla skali mikro i nano. Takie sprzężenie zwrotne jest kluczowe w modelach wieloskalowych. Modele hybrydowe pozwalają rozwiązać problem w kilku skalach w wyniku dekompozycji określonej przestrzeni. W podejściu tym obszar globalny opisuje skala makro natomiast lokalny skala mikro bądź nano. W metodach tych również, wykorzystuje się modele konwencjonalne oraz metody alternatywne gdzie np. do opisu skali rzadkiej stosuje się MES a do skali zagęszczonej Automaty Komórkowe.

4.2 Automaty Komórkowe

Zawarta w tym podrozdziale część pracy ma na celu wprowadzenie czytelnika w

podstawy teoretyczne metody Automatów Komórkowych. By zrozumieć idee tej metody zostaną podane jej główne definicje oraz zastosowania opracowane na podstawie publikacji [11,12,15,16].

Za twórcę i prekursora badań nad automatami komórkowymi uważa się węgierskiego uczonego Johna von Neumanna. Przez lata czysto teoretyczne rozważania nie miały jednak swojego zastosowania. Przełomem stały się lata

osiemdziesiąte, XX wieku, kiedy to podjęto próby sklasyfikowania CA. Od tego czasu stały się one ważnym narzędziem wykorzystywanym w wielu dziedzinach nauki, a od niedawna również w inżynierii materiałowej.

Automaty komórkowe są przykładem tego, że wprowadzenie prostych zasad i lokalnych oddziaływań może prowadzić do odzwierciedlenia bardzo różnorodnych i skomplikowanych zachowań.

Opisać tę metodę można za pomocą następujących parametrów:

a) uporządkowana siatka L złożona z jednakowych komórek C_i przestrzeni D – wymiarowej,

b) zbiór stanów S_i pojedynczej komórki (ten sam dla wszystkich komórek k , zawierający k elementów),

c) reguła f określająca stan komórki w chwili $t+1$ w zależności od stanu w chwili t tej komórki i komórek ją otaczających:

$$| \quad , \quad (4.1)$$

gdzie:

$N(r)$ – zbiór sąsiadów komórki r

r – nr bieżącej komórki

t – dyskretny krok czasowy

i – pojedyncza komórka

f_i ,
(4.2)

Tak zdefiniowane pojęcie nosi nazwę deterministycznego automatu komórkowego[15]. Jeśli natomiast reguła f zależy od zmiennej losowej to taki automat nazywamy probabilistycznym.

Podstawową zaletą przedstawionego powyżej podejścia jest założenie skończonych rozmiarów siatki komórek, których stany zmieniają się synchronicznie w dyskretnie zdefiniowanym kroku czasowym, a po przez założenie oddziaływania tylko z najbliższymi sąsiadami pomijają one również, wpływy oddziaływań dalekiego zasięgu.

Najbardziej popularne automaty komórkowe rozpatrujemy w przestrzeniach :

a) 1D, gdzie automat definiuje się jako kolonie komórek w kształcie linii prostej. Jest to najprostsza forma automatu komórkowego nazywana automatami elementarnymi, w którym istnieje otoczenie złożone z dwóch sąsiadów.

Rysunek 11 Sąsiedztwo automatu 1D

b) 2D, gdzie automat jest określony w zależności do kształtu komórki np. dla kwadratu przyjmuje się automat w kształcie prostokąta. Najczęściej stosuje się sąsiedztwo von Neumann'a i Moore'a.

Rysunek 12 Sąsiedztwo automatu 2D (von Neumanna i Moore'a)

Prowadząc rozważania na temat tej metody, nie można pominąć zagadnienia jakim jest klasyfikacja Automatów Komórkowych. Ponieważ ewolucja CA jest zależna od reguł automatu jak i od stanu początkowego, istnieje próba opisu konkretnych cech automatu tylko na podstawie jego reguł. Najpowszechniej przyjętą klasyfikację wprowadził Wolfram. Wyróżnia on następujące podejścia, w którym automaty:

- a) ewoluują do stanu jednorodnego, w którym stan wszystkich komórek przyjmuje taką samą wartość;
- b) prowadzą do prostych nie zmieniających się struktur;
- c) prowadzą do struktur chaotycznych;
- d) osiągają stan trwałych konfiguracji o długich czasach życia.

4.3 Metoda Elementów Skończonych

Automaty komórkowe w połączeniu z metodą elementów skończonych stanowią bardzo zaawansowane narzędzie do badania materiałów. Sama metoda elementów skończonych już od wielu lat jest podstawową w modelowaniu tak w metalurgii jak i inżynierii materiałowej. Jej uniwersalność, polegająca na łatwości dyskretyzacji różnych obszarów o skomplikowanej geometrii, tak że niejednorodnych, kwalifikuje ją jako dobre narzędzie do modelowania problemów fizycznych. Rozwój metody elementów skończonych przebiegał i nadal przebiega, równoległe z rozwojem techniki komputerowej.

W pracach [13] są przedstawione różne podejścia wykorzystania MES do obliczeń zachowania się materiału w różnych próbach i skalach. Podobnie w pracy [12]

25

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

autor przedstawia metodę CAFE, czyli specyficzną technikę wykorzystującą automaty komórkowe do badania zachowania materiału.

Możliwości metody elementów skończonych sprawiły, że powstało wiele programów komercyjnych umożliwiających rozwiązywanie problemów inżynierskich tą techniką. Przykładem takiej aplikacji jest Abaqus powszechnie używany na świecie w przemyśle maszynowym i samochodowym, hutniczym, stoczniowym i lotniczym. Architektura programu oparta jest na koncepcji bibliotek. Pozwoliło to na stworzenie możliwości łączenia dowolnych ich elementów. Użytkownik może tworzyć dowolne kombinacje elementów skończonych, materiałów, procedur analizy i sekwencji obciążeń.

4.4 Modele wzrostu

W literaturze jest grupa prac nad modelami wzrostu wykorzystującymi techniki alternatywne takie jak CA, MD i MC. Metody oparte na automatach komórkowych, bazują na dwóch głównych podejściach: deterministycznym i probabilistycznym. W modelach deterministycznych z definicji CA zmiany stanów komórek zachodzą tylko i wyłącznie w oparciu o reguły przejść i najbliższe otoczenie. Natomiast modele probabilistyczne wykorzystują dodatkowo zmienną losową jako parametr decydujący o zmianie stanów układu. Na podstawie literatury wyróżnione modele wymienione poniżej, których zasady wykorzystano w niniejszym opracowaniu.

W pracy [17] zostało zaproponowane podejście deterministyczne, w którym autor stwierdził, że ruch osadzonych cząstek jest uzależniony od miejsca osadzenia, a ich ruch jest prowadzony w kierunku osiągnięcia lokalnego minimum energii. Praca

[18] proponuje podejście, w którym ruch cząstek jest promowany w kierunku osiągnięcia maksymalnej liczby koordynacyjnej. Natomiast autor pracy [19] opracował podejście, w którym cząsteczki mają poruszać się do miejsca, w którym dojdzie do połączenia z inną cząstką.

Rozdział 5

Cel pracy

Głównym celem pracy postawionym przez autora jest opracowanie modelu oraz narzędzia do symulacji i analizy wzrostu warstw w materiałach nanometrycznych. Opracowanie takiego modelu wymagało połączenia metod analitycznych z zaawansowanymi metodami komputerowymi. W tym celu autor wybrał metodę automatów komórkowych, która posłuży do zaimplementowania aplikacji w języku programowania C++.

Bazując na analizie literatury, przedstawionej w poprzednim rozdziale można sformułować następujące cele częściowe:

- Określenie mechanizmów mających wpływ na ewolucję powierzchni w czasie wzrostu. Dokonanie wyboru najistotniejszych zjawisk, które pozwolą na jak najbardziej rzeczywiste oddanie procesu wzrostu dla technik napyłania MBE.
- Na podstawie wybranych procesów, opracowanie modelu przy wykorzystaniu metody automatów komórkowych. Określenie założeń w celu sformułowania ogólnych reguł dla automatu oraz uproszczeń mających przyspieszyć obliczenia.
- Zaimplementowanie modelu w języku programowania C++.
- Stworzenie aplikacji przy pomocy środowiska Microsoft Visual Studio 2008 pozwalającej na analizę i wizualizację wyników. W tym celu opracowano interfejs dla użytkownika, który pozwala na modyfikowanie parametrów w rosnącej warstwie.
- Analiza rosnących warstw w zależności od doboru parametrów

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

- Analiza symulacji MES spęczania materiału, który otrzymano w wyniku zastosowania własnego oprogramowania do generacji powłok. Porównanie otrzymanych rozkładów intensywności naprężeń i odkształceń w materiale z rezultatami uzyskanymi bez uwzględnienia nieciągłej granicy pomiędzy warstwami otrzymanymi za pomocą klasycznej metody MES.
- Dodatkowe dyskusje dotyczące wyników pod kątem możliwości pęknięcia materiału ze względu na otrzymanie dokładniejszych rozwiązań dotyczących lokalizacji i wartości maksymalnego naprężenia na granicy pomiędzy warstwami.

Rozdział 6

Model

Przedstawione w niniejszej pracy modele wzrostu warstw w powłokach nanometrycznych bazują na zagadnieniach opracowanych w rozdziale 3. Jak czytelnik zdążył zauważyć wzrostowi powierzchni towarzyszy wiele skomplikowanych procesów dziejących się również, w skali atomowej. Pełne opisanie tych zjawisk dostępnymi metodami jest albo niemożliwe albo bardzo trudne i czasochłonne. Autor w sposób ogólny zdołał wprowadzić czytelnika w dużą liczbę zagadnień związanych z tym tematem. Modele, które zostały opracowane są tylko i wyłącznie pewnym przybliżeniem rzeczywistych procesów. Takie podejście oraz wprowadzenie koniecznych ograniczeń pozwoliło skoncentrować się na najbardziej istotnych procesach decydujących o charakterze wzrostu warstw. Oczywiście w zależności od oczekiwanych wyników, stopień tych przybliżeń może być różny.

Autor dla realizacji tematu tej pracy stworzył trzy modele. Było to zabiegiem celowym, ponieważ każdy z modeli, który będzie kolejno wprowadzany stanowi wersję rozszerzoną swojego poprzednika. Dzięki takiemu podejściu będzie można porównać jaki wpływ mają zastosowane modele na otrzymywaną morfologię granicy międzypowłokowej.

W opisanych podrozdziałach zostanie przedstawione ogólne założenie budowy automatu komórkowego dla modeli wzrostu oraz zaproponowane reguły przejścia dla konkretnych podejść.

29

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

6.1 Model automatu komórkowego

W modelowaniu z wykorzystaniem technik komputerowych najbardziej istotnym zadaniem jest sprowadzenie danego problemu do postaci dyskretnej. Również definicja metody automatów komórkowych wprowadza dyskretyzację domeny, na której prowadzone są obliczenia. Dlatego zgodnie z tym podejściem, konieczne było wprowadzenie pewnych założeń, tak aby zaadaptować wyżej wymienione techniki i odwzorować mechanizmy wzrostu.

Tworzenie modelu automatu komórkowego opiera się na następujących etapach :

- określenie siatki obliczeniowej - L ,
- zdefiniowanie zmiennych stanu dla pojedynczej komórki - S ,
- zdefiniowanie dodatkowych zmiennych wewnętrznych - W ,
- określenie rodzaju sąsiedztwa - N ,
- zdefiniowanie reguł zmian stanu - f .

Omówione etapy zostaną przedstawione w kolejnych podrozdziałach.

6.1.1 Określenie siatki obliczeniowej

W zależności od wymiaru zagadnienia, siatka obliczeniowa może być dwu- lub trzywymiarowa. Dla badanego problemu wykorzystany został przypadek dwuwymiarowy. Układ powstających warstw przybliżany jest gazem siatkowym, gdzie cząstki mogą zajmować wyłącznie dyskretne pozycje. Oczywistym założeniem powinien być taki dobór geometrii siatki aby odwzorować naturalną symetrię warstwy. Autor rezygnuje jednak z tego założenia, przybliżając rzeczywistą strukturę warstwy prostą siecią regularną. Na ogół deklaruje się liczbę komórek, gdzie każda reprezentuje skończoną objętość cząstki. W dalszej części pracy, jednoznacznie będzie używane pojęcie komórka – cząstka. Komórka jako składowa automatu, a cząstka jako jej fizyczna interpretacja. Dlatego mechanizmy napyłania – osadzania, oraz dyfuzji cząstek

30

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

będą rozumiane jako zmiany stanu komórek. Na rysunku 1.3 został przedstawiony

schemat ilustrujący budowę modelu automatu komórkowego. Przyjmujemy następujące parametry dla automatu :

- x - szerokość automatu – liczba kolumn
- y – wysokość automatu – liczba wierszy
- $h(i)$ – wysokość kolumny komórek
- $cszer$ – wysokość i szerokość komórki

Rysunek 13 Schemat budowy automatu komórkowego dla opracowanych modeli

Przez kolumnę cząstek będziemy rozumieć określoną liczbę cząstek ułożonych jedna na drugiej według klasy układów cząstka na cząstce. Klasy tych układów zostaną omówione poniżej.

6.1.2 Określenie zmiennych stanu

Przyjęcie regularnej siatki obliczeniowej, powoduje rezygnację z sytuacji gdy w powstającej warstwie tworzą się defekty i wakacje, którymi mogą być na przykład puste miejsca w strukturze warstwy. Sprowadza to rozpatrywane zagadnienie do układu, gdzie każda cząstka spoczywa bezpośrednio na innej, sąsiedniej. Schemat taki nazywany jest klasą układów cząstka na cząstce, natomiast wprowadzone pojęcie

31

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

kolumny komórek, oznacza określoną liczbą cząstek ułożoną w taki sposób w wymiarze pionowym.

Każda komórka w siatce posiada taką cechę jak stan. Opierając się na klasycznej definicji automatów stan ten jest dyskretny. W opisywanym modelu wprowadzono zmienną określającą czy w danej jednostce czasu miejsce to jest zajęte przez cząstkę czy nie jest. Zmienna może przyjmować następujące wartości:

0
a
(6.1)
1
!" a#

Ilustrację takiej sytuacji przedstawiono na rysunku 13. W miejscu a we wcześniejszych etapach napylania została osadzona cząstka, co spowodowało pojawienie się załączka nowo rosnącej warstwy. Natomiast w miejscu b istnieje prawdopodobieństwo, że w następnym kroku czasowym pojawi się cząstka w wyniku osadzania bądź migracji powierzchniowej. Stany komórek rosnącej warstwy mogą zmieniać się do czasu gdy komórki nie zostaną trwale wbudowane w powierzchnię.

6.1.3 Określenie dodatkowych zmiennych wewnętrznych

Praca ze złożonymi automatami komórkowymi wiąże się z wprowadzeniem pewnych dodatkowych zmiennych wewnętrznych. Wartości te mogą zostać wykorzystane w różnoraki sposób. Autor niniejszej pracy wprowadza zmienne wewnętrzne, które będą opisywać rodzaj napylanego materiału w danym kroku czasowym. Ponieważ powstająca powierzchnia będzie składać się z kilku różnych powłok, bardzo istotna jest możliwość przyporządkowania komórek do materiału, w którego skład wchodzi. Zmiany wartości tego parametru będą zachodzić w identyczny sposób jak zmiany wartości stanów. Zmienna ta może przyjmować wartości w następujący sposób :

$$\begin{aligned}
 & 0 \text{ " " } (*)^1 \\
 & \eta_i \& \quad 1 \text{ " " } (*)^2 \quad - \\
 & \text{" 1 " } (*)^1 \text{ " " } \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

32

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

6.1.4 Określenie rodzaju sąsiedztwa

Na dobór rodzaju sąsiedztwa w modelu automatu komórkowego należy zwrócić szczególną uwagę. Pracując z geometrią siatki nie posiadającą żadnych defektów, a więc pracując w układzie cząstka na cząstce, odpowiedni dobór sąsiedztwa może mieć bardzo duży wpływ na otrzymywane wyniki. Autor pracy w zaproponowanym modelu zastosował sąsiedztwo Moore'a przedstawione na rysunku 14. Wybór ten jest na tyle istotny, gdyż na zmianę stanu komórki będą miały wpływ wartości wszystkich jej ośmiu sąsiadów. Dodatkowo ważnym elementem w doborze sąsiedztwa jest określenie jego wymiaru. W pracy zostało wykorzystane najbliższe sąsiedztwo z możliwością rozbudowy algorytmu.

Rysunek 14 Sąsiedztwo Moore'a z zaznaczonymi kierunkami.

6.1.5 Zdefiniowanie reguł zmian stanu

Reguły zmian stanu komórek, nazywane tak że regułami przejścia odpowiadają w automatach komórkowych za dynamikę modelu. Szczegółowe omówienie wszystkich opracowanych reguł zostanie przedstawione w następujących podrozdziałach. W tym miejscu nadmienione zostaną informacje przydatne w zrozumieniu ich własności i ograniczeń.

Reguły przejść dla każdej komórki w siatce są stosowane w sposób synchroniczny. Nowy stan komórki wynika z jej stanu w poprzednim kroku czasowym oraz ze stanu komórek sąsiednich. Stany komórek powinny się zmieniać w taki sposób

33

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

aby ewolucja układu automatu prowadziła do stanu jednorodnego. Przez stan jednorodny będziemy rozumieć sytuację w której cała powłoka zostanie napylna, a wszystkie cząstki na powierzchni w nią wbudowane.

Jak już autor pracy nadmienił, reguły zmian stanu uwarunkowane są przez dynamikę modelu. Dlatego skonstruowanie modelu opiera się na procesach mających na nią największy wpływ. Przedstawione podejście koncentruje się wyłącznie na procesach odpowiedzialnych za zachowanie się cząstek na powierzchni rosnącej warstwy, czyli na :

- a)depozycji cząstki (adsorpcja),
- b)powierzchniowej migracji cząstek (dyfuzja powierzchniowa).

Dla opracowanych algorytmów oraz modeli wzrostu przyjęte są następujące założenia dotyczące dynamiki modelu, które są zilustrowane na rysunku 15.

Rysunek 15 Ilustracja procesów zachodzących w automacie.

Pracując w klasie modeli cząstka na cząstce, depozycja może odbywać się wyłącznie na cząstkach, które zostały już osadzone w miejscach oznaczonych na rysunku 15 kolorem niebieskim b. Natomiast procesowi migracji podlegają te, których wybór uwarunkowany jest wypracowanym podejściem. W tym miejscu należałoby zwrócić uwagę, że będą mogły przemieszczać się wyłącznie te cząstki, które znajdują się w warstwie wierzchniej a.

34

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

6.2 Model nanoszenia przypadkowego

Model nanoszenia przypadkowego jest pierwszym krokiem w kierunku skonstruowania podejścia, które w jak najbardziej rzeczywisty sposób będzie odzwierciedlać procesy zachodzące podczas wzrostu powłok.

Model MNP zakłada całkowite zamrożenie dyfuzji powierzchniowej, a co z tego wynika geometria rosnącej warstwy będzie uzależniona tylko i wyłącznie od procesu adsorpcji. Ten ostatni proces opiera się na parametrze θ . Jest to parametr określający ilość cząstek osadzanych na powierzchni podczas jednego kroku czasowego i będzie on nazywany natężeniem strumienia.

Na rysunku 16 została zilustrowana sytuacja, która występuje podczas jednego kroku czasowego. Pierwsze cząstki osiadają na podłożu, natomiast kolejne opadają na szczyt powstających kolumn, które składają się z cząstek ułożonych jedna na drugiej. Prawdopodobieństwa zaistnienia każdej lokalizacji są jednakowe. Powstałe w wyniku takiego podejścia modele nie są wiarygodnym odzwierciedleniem rzeczywistości, a jedynie pewnym, jej dalekim przybliżeniem.

Rysunek 16 Ilustracja procesu MNP: (a) sytuacja w czasie t , (b) sytuacja w czasie $t+1$

Przedstawiony poniżej pseudokod przedstawia fragment algorytmu jaki został opracowany dla tego modelu.

35

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

```
for i := 0 to theta *ilość kolumn do  
kolumna := losuj % ilość kolumn() ;  
ostatni wiersz := ilość wierszy() ;
```

```

for i := ostatni wiersz to 0 do
if stan komórki(i, kolumna) = 0 then
zmień stan(i, kolumna, 1);
zmień materiał(i, kolumna, id materiału);
break;

```

W wypadku nanoszenia przypadkowego ani na szybkość osadzania ani na złożoności obliczeniową nie ma wpływu ilość komórek osadzanych w danym kroku czasowym. Zgodnie z algorytmem jest losowana kolumna, na której ma zostać osadzona cząstka, a następnie jest poszukiwany jej wierzchołek. Jeżeli cała kolumna jest zapełniona, to losowanie jest powtarzane.

6.3 Model lokalnego minimum

Model lokalnego minimum jest rozszerzeniem MNP o dyfuzję powierzchniową cząstek. Ruch cząstek jest uwarunkowany deterministyczną regułą zaproponowaną przez Familie'go[17] i stwierdza on, że cząstki dążą do osiągnięcia swojego lokalnego minimum energii.

Autor pracy zaproponował następujące podejście. Komórki osadzone na powierzchni warstwy w danym kroku czasowym oraz te osadzone wcześniej są poddawane selekcji. Ma ona na celu wyłonić te komórki, które mają szansę poruszyć się w danym kroku czasowym. Za całość operacji odpowiedzialna jest funkcja:

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i+1})^2 \quad (6.3)$$

Sprawdza ona wysokość sąsiednich kolumn. Jeżeli istnieje kolumna z mniejszą wartością niż ta, na której znajduje się cząstka, to ta kolumna zostaje wytypowana jako

36

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

cel ruchu. Ilustrację takiej sytuacji stanowi rysunek 17, na którym jest widoczne, że komórki oznaczone kolorem czerwonym, zostały wyselekcjonowane, jako te które będzie obejmował proces dyfuzji.

Rysunek 17 Ilustracja modelu MLM. Cząstki wybrane w procesie selekcji.

Wyselekcjonowane komórki zmieniają swój stan w sposób określony przez regułę przejścia. Zmiany stanów będą ilustrować proces przemieszczania się cząstek. Reguła przejścia dla MLM jest podzielona na trzy scenariusze przedstawione na rysunku 18.

37

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 18 Reguła przejścia dla MLM. Komórka porusza się w kierunku (a) SE, (b) SW, (c) SE lub SW.

Dla scenariuszy (a) i (b) komórka tylko w jednym kierunku posiada minimum lokalne i w to miejsce zostanie wykonany ruch. Natomiast w przypadku (c) komórka posiada dwa minima lokalne dlatego w celu określenia kierunku przemieszczenia konieczne będzie wykorzystanie funkcji losującej.

Fragment algorytmu selekcji przedstawiony w pseudokodzie:

```
for i := 0 to ilość kolumn do
  j := ilość wierszy ;
  while pobierz stan(j,i) = 1
  if pobierz stan(j-1,i) = 0 then
  if kierunekSW || kierunekSE = 0 then
  dodaj komórkę(komórka) ;
  j--;
```

38

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

6.4 Model probabilistyczny

Zamiast deterministycznej reguły opartej na żądaniu lokalnego minimum, autor opracował także, model oparty na probabilistycznych CA, który jest zwieńczeniem jego badań nad mechanizmami wzrostu warstw. Model będzie korzystał z wprowadzonych podejść: MNP i MLM.

Klasa algorytmów probabilistycznych w swoim działaniu wykorzystuje efekt losowości. W praktyce oznacza to, że w implementacji takich algorytmów znajduje się generator liczb losowych. Istotną zaletą takiego podejścia w porównaniu z rozwiązaniami deterministycznymi jest uśrednienie rozwiązania. Duża złożoność zjawiska jakim jest wzrost warstw na poziomie atomowym sprawia trudności w dokładnym ich poznaniu, a co z tego wynika pełne odzwierciedlenie tych zjawisk jest bardzo trudne, a nawet niemożliwe. Uśrednienie rozwiązania powoduje, że możemy przybliżyć zjawiska, które wpływają na bardzo chaotyczne zachowanie się

cząstki.

Na procesy desorpcji i dyfuzji powierzchniowej, wpływa wiele czynników zewnętrznych powodujących, że cząstka zachowuje się w określony sposób. Deterministyczne reguły przejść nie biorą pod uwagę takich zdarzeń, dlatego bardzo istotne jest wprowadzenie do reguł przejścia elementów losowości.

Dalsza część tego podrozdziału zostanie podzielona na następujące części :

- 1)selekcja cząstek podlegających dyfuzji
- 2)reguły przejścia – scenariusze
- 3)fragmenty algorytmu w pseudokodzie

Selekcja

Komórki, które mogą wykonać ruch są kwalifikowane w ściśle określony sposób.

Reguły jakie do tego celu zostały opracowane wyglądają następująco:

a)w pierwszej kolejności jest sprawdzany kierunek N komórki, jeżeli nie ma ona bezpośrednio nad sobą sąsiada, to przechodzi do kolejnego etapu kwalifikacji, a

39

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

b)następnie są sprawdzane kierunki SW i SE. Jeżeli komórka posiada choć w jednym tym kierunku wolną lokalizację, to zostaje jej dopisany ten kierunek, a proces selekcji zostaje zakończony. Jeżeli nie występuje to sprawdzany jest kolejny warunek, czyli

c)zostają sprawdzane kierunki W i E. W tym przypadku komórka nie posiada lokalnego minimum, tylko ewentualnie będzie się poruszać po tarasie.

Kolejność podpunktu b) i c) jest bardzo istotna, ponieważ jeżeli komórka nie ma w miejscu SW i SE sąsiada, to oczywiście nie posiada także ich w miejscach W i E. Ten fakt staje się istotny w trakcie implementacji algorytmu ponieważ, zmniejsza to złożoność i tym samym czas obliczeń.

Rysunek 19 ilustruje grupę wyselekcjonowanych komórek. W dalszej części podrozdziału zostaną omówione reguły odpowiedzialne za zmiany ich stanów.

Rysunek 19 Selekcja w modelu probabilistycznym.

Reguły przejść

Opracowanie odpowiednich reguł przejścia wiąże się z poznaniem możliwych scenariuszy dotyczących danej cząstki. Samo zakwalifikowanie jej do grupy cząstek z możliwością ruchu jest dopiero pierwszym etapem związanym z migracją powierzchniową. Kolejny etap uzależniony jest od temperatury. Jak już zostało to omówione wpływa ona bardzo istotnie na energie cząstek, a co się z tym wiąże na ich mobilność. Autor na podstawie własnych przemyśleń i badań literaturowych wypracował podejście w którym prawdopodobieństwo ilości przemieszczeń jest funkcją temperatury.

40

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Oto zaprezentowane reguły przejścia dla kolejnych scenariuszy zachodzących w CA:

1) Komórka posiada możliwie największe energie w lokalnym otoczeniu, co z tego wynika prawdopodobieństwo jej ruchu P1 jest największe z możliwych. Ruch w kierunkach SW i SE jest równomiernie prawdopodobny. Ilustracja przedstawionej sytuacji na rysunku 20.

Rysunek 20 Scenariusz nr 1 dla MP.

2) Komórka dotarła do brzegu warstwy. Jeśli posiada dostatecznie dużą energię, aby przełamać barierę jaka występuje w tym miejscu, to może przesunąć się w kierunku SW (SE). Jeśli ta próba zakończy się niepowodzeniem, to komórka

albo zostanie na miejscu, albo będzie poruszać się po tarasie w kierunku W(E). Prawdopodobieństwa ruchu wynoszą odpowiednio $P1 > P_{SW(SE)} > P_{W(E)} > P_{brak}$. Sytuację prezentuje rysunek 21.

Rysunek 21 Scenariusz nr 2 dla MP.

3) W tej sytuacji komórka znajduje się również, nad brzegiem warstwy, jednak z tą różnicą, że jest częścią załączka nowo powstającej warstwy. Oderwanie się od tej grupy jest procesem zachodzącym raczej rzadko i dopiero przy wysokich

temperaturach. Prawdopodobieństwo zajścia tego ruchu można opisać następująco : $P1 > P2 > P3 > P_{brak}$. Sytuację ilustruje rysunek 22.

41

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 22 Scenariusz nr 3 dla MP.

4)W następnej sytuacji komórka ma mo żliwe lokalizacje w kierunkach W i E. Ilustruje to sytuacje gdy komórka porusza si ę po tarasie i, aby przeskoczyć w

inne miejsce jest konieczne osiągnięcie pewnej energii, zatem w tym przypadku ruch jest prawdopodobny z następującą wartością: $P1 > P2 > P3 > P4 > P_{brak}$. Ilustracja do sytuacji na rysunku 23.

Rysunek 23 Scenariusz nr 4 dla MP.

5)Sytuacja dla scenariusza 5 zachodzi bardzo rzadko, ponieważ oderwanie

komórki od warstwy w takich wypadku wymaga odpowiednio bardzo dużej energii (wysokiej temperatury). $P1 > P2 > P3 > P4 > P5 > P_{brak}$. Ilustracja sytuacji rysunek 24.

Rysunek 24 Scenariusz nr 5 dla MP.

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Na podstawie omówionych reguł przejścia, komórki zmieniają swój stan. Dla pełniejszego zilustrowania działania modelu zostaną przedstawione fragmenty kodu dla:

a) Selekcji:

```
for i := 0 to ilość kolumn do
```

```
  j := ilość wierszy ;
```

```
  while pobierz stan(j,i) = 1
```

```
    if pobierz stan(j-1,i) = 0 then
```

```
      if SW(j,i) && SE(j,i) && E(j,i) && W(j,i) = 1 then // brak reakcji, komórka w ka żdym
```

```
        // kierunku ma sąsiada
```

```
      else
```

```
        dodaj komórke(komórka) ;
```

```
      j--;
```

b) określenia kierunku:

```
if N(komórka) = 0 then
```

```
  if W(komórka) && E(komórka) && SW(komórka) = 0 then ruchSE(komórka) ;
```

```
  else if W(komórka) && E(komórka) && SE(komórka) = 0 then ruchSW(komórka) ;
```

```
  else if W(komórka) && SE(komórka) = 0 then ruchE(komórka) ;
```

```
else if SW(komórka) && E(komórka) = 0 then ruchW(komórka)
```

```
else if W(komórka) && E(komórka) = 0 then
```

```
losuj_kierunek();
```

```
ruchSW|SE(komórka)
```

```
else if SW(komórka) && SE(komórka) = 0 then
```

```
losuj_kierunek();
```

```
ruchW|E(komórka)
```

43

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Opisane reguły zostały zaimplementowane i w ten sposób powstała aplikacja do przeprowadzania symulacji wzrostu warstw. Podejściem, któremu należałoby poświęcić najwięcej uwagi jest zatem MP.

Rozdział 7

Wyniki

Na podstawie opracowanych modeli wzrostu warstw wykonano symulacje.

Przeprowadzone badania miały następujące cele:

- opracowanie charakterystyki powstającej powierzchni dla zaprojektowanych modeli;
opracowanie wyników i określenie, jaki wpływ mają dane wejściowe na powstające warstwy w modelu probabilistycznym;
- wykonanie symulacji spęczania dla opracowanego modelu probabilistycznego i porównanie wyników w postaci rozkładów intensywności odkształceń i naprężeń otrzymanych po uwzględnieniu geometrii powłok wygenerowanych tym modelem i bez jego zastosowania, czyli tradycyjnie wykonanym modelem MES.

Przed przystąpieniem do omawiania przeprowadzonych symulacji należałoby przybliżyć pewne pojęcia i parametry, które zostały uwzględnione przy prowadzeniu badań. Wśród nich wyróżniamy:

- natężenie strumienia θ , określającego ilość cząstek osadzanych w jednym kroku czasowym;
 - relaksacja T – współczynnik temperaturowy, odpowiedzialny za ilość przemieszczeń przypadających na jedną cząstkę w danym kroku czasowym;
 - chropowatość warstwy, średnie odchylenie standardowe wysokości h kolumny
- 5.iodśredniej grubości warstwy

6 7. 58

45

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

7.1 Charakterystyka powierzchni

Podrozdział ten jest poświęcony badaniu powierzchni układu wielowarstwowego. Przygotowując symulacje autor określił zakres wartości dla parametrów wejściowych w każdym modelu w celu ich porównania :

- wymiar układu 500x500 cząstek;
- stosunek periodycznie ułożonych dwóch warstw (zew/wew) {2:1, 4:1, 8:1};
- natężenie strumienia $\theta = \{0,1; 0,25; 0,5; 1\} [s^{-1}]$;
- relaksacje $T = \{0, 1, 5, 10\} [s^{-1}]$;

7.1.1 Porównanie geometrii warstwy dla opracowanych modeli

MNP

Dane wejściowe :

$\theta = 1 [s^{-1}]$

$T =$ brak dyfuzji

Dla opracowanych modeli, geometria powstających warstw jest bardzo zróżnicowana i zależna bezpośrednio od zmiany parametrów wejściowych. Różnicę wprowadza zastosowany model nanoszenia przypadkowego, w którym migracja cząstek jest całkowicie zamrożona. Warunkiem powstawania warstwy jest element losowości, który wpływa na to, jaką lokalizację w siatce CA wybierze osadzana komórka. Jak możemy zauważyć na rysunku 25 powierzchnia powstała w ten sposób charakteryzuje się bardzo stromymi przejściami między sąsiednimi kolumnami. Powstaje wiele tzw. kominów. Ten fakt świadczy o niemożności zajścia dyfuzji. Chropowatość układu pogłębia się wraz z kolejnymi etapami nanoszenia. Dobór natężenia strumienia nie ma bezpośredniego wpływu na geometrię warstwy, a jedynie na jego dynamikę. W

46

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

przypadku MNP można mówić raczej o zasumieniu granicy zmianą losową, a nie o procesie fizycznym.

Rysunek 2 5 Symulacja MNP. Stosunek warstw zew/we w 2:1.

MLM

Dane wejściowe :

$\theta = 0,25 \text{ [s-1]}$

$T = 5 \text{ [s-1]}$

W modelu lokalnego minimum, generowanie powłok wygląda już znacznie odmiennie. Manipulowanie parametrami θ i T , powoduje, że możemy otrzymywać warstwy z różnym stopniem gradientu na granicy faz.

Na rysunku 26 są przedstawione wyniki takich symulacji.

47

Wieloskalowy model w zrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 26 Symulacja MLM. Stosunek warstw zew/w ew 2:1.

Wprowadzony proces dyfuzji powoduje, że model staje się bardziej wiarygodny i można nim przybliżyć rzeczywistą granicę faz, jednakże stanowi on dość duże uogólnienie. Chropowatość powstałej powierzchni nie wykazuje występowania kominów, co jest pierwszą zaletą opracowanego modelu. Nie równości warstwy powstają w sposób bardziej zbliżony do rzeczywistego. Oczywiście dla różnego zakresu wartości danych wejściowych geometria warstwy może być bardziej lub mniej podobna do rzeczywistych geometrii. Jednak określanie dokładnych wartości nie jest celem tej pracy bo to jest już przedmiot optymalizacji parametrów procesu nanoszenia, co znacznie wykracza poza zakres niniejszej pracy.

48

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

MP

Dane wejściowe :

$$\theta = 0,25 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

$$T = 5 \text{ [s}^{-1}\text{]}$$

Wyniki symulacji uzyskane po zastosowaniu modelu probabilistycznego przedstawiono na rysunku 27, z którego wynika, że wykazuje one pewne cechy podobne do MLM. Świadczy to o tym, że obydwa algorytmy oparte są o podobne reguły przejścia z tą różnicą, że w modelu MP wprowadzone są dodatkowe warunki wpływające w znacznym stopniu na symetrię powstałej warstwy. Kluczowym argumentem jest wprowadzenie zasady, że cząstki mogą poruszać się po płaskiej powierzchni, szukając miejsc do zajęcia, które to miejsca są najbardziej korzystne energetycznie. Układ charakteryzuje się mniejszą chropowatością w stosunku do MLM oraz efekt ten nie ma tendencji wzrostowej dla następnych rosnących warstw.

Rysunek 2 7 Symulacja MP. Stosunek warstw zew/we w 2:1.

49

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Sam proces wzrostu jest znacznie wolniejszy, co jest związane ze znacznie większą złożonością obliczeniową w porównaniu z modelem MLM.

7.1.2 Model probabilistyczny – symulacje dla różnych danych

wejściowych.

W tym podrozdziale autor przeprowadzi analizę wpływu natężenia strumienia i relaksacji na geometrie powstających warstw. W pierwszej kolejności zbadane zostały warstwy dla $T = \{1, 5, 10\}$ [s-1]. Ilustracja do tego zagadnienia jest przedstawiona na rysunku 28, na którym jest widoczne w jakim stopniu mobilność cząstek wpływa na powstawanie gradientu między warstwami.

Rysunek 28 Symulacja MP. Stosunek warstw zew/wew 2:1. $\theta = 0,25$. (a) $T = 1$ (b) $T = 5$ (c) $T = 10$ [s⁻¹].

50

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

W przypadku (a) mobilność cząstek jest znacznie ograniczona, ponieważ powierzchnia cechuje się znacznym zwiększeniem chropowatości. W kolejnych przypadkach (b) i (c) współczynnik T zostaje zwiększony do wartości $T=5$ i $T=10$ [s⁻¹], a co z tym jest związane w kroku czasowym cząstka posiada większą mobilność i

może osiągnąć lepszą lokalizację. W ten sposób powstają warstwy wygładzone bez większych zaburzeń symetrii.

Modyfikowanie powierzchni zachodzi również, przy zmianie parametru jakim jest natężenie strumienia. Ilustracja 29 pokazuje jak zmiana tego współczynnika wpływa na granice między warstwami. W przypadku (a) parametr θ ma wartość 0.1, co z tego wynika w danym kroku czasowym napylane zostaje 10 procent cząstek. Im więcej cząstek zostaje napylanych przy nie zmienionej wartości relaksacji, tym granica faz staje się bardziej chropowata (b), (c), (d).

[s-1].

51

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Opisana sytuacja ma miejsce, gdyż cząstki są osadzane jedna na drugiej. Jeżeli mniej cząstek ulega relaksacji albo muszą one dłużej czekać na wykonanie ruchu to zachodzi duże prawdopodobieństwo, że w tym czasie zostaną na stałe wbudowane w rosnącą warstwę.

7.2 Symulacja spęczania – porównanie

Jednym z ważnych celów tej pracy było przeprowadzenie próby spęczania dla materiału wygenerowanego we własnym oprogramowaniu. Wykorzystano w tym celu model probabilistyczny z parametrami, które ilustrowały dwa przypadki: układ z relaksacją oraz z częściowym jej zamrożeniem. Analiza otrzymanych wyników przysłużyła do porównania otrzymanych rozkładów intensywności naprężeń i odkształceń w materiale

z rezultatami uzyskanymi bez uwzględnienia nieciągłej granicy pomiędzy warstwami otrzymanymi za pomocą klasycznej metody MES.

Proces spęczania jest operacją, przy której następuje skracanie wymiaru jednej z głównych osi przekroju w skutek, czego zwiększa się przekrój prostopadły do tej osi. W rozpatrywanym przypadku zastosowano najprostszą próbę spęczania, gdzie nie uwzględniono tarcia między równomiernie gładkim narzędziem, a badanym materiałem. To uproszczenie z punktu widzenia praktyki doświadczalnej związanej z badaniami powłok takimi jak np. próba wciskania wglębnika, nie jest uproszczeniem niedopuszczalnym. W tego typu badaniach dąży się do beztarciovych warunków na kontakcie pomiędzy próbką, a narzędziem. Należy dodać, że w niniejszej pracy zostało pokazane doświadczenie modelowe, którego w rzeczywistości się nie przeprowadza, gdyż próba spęczania nie jest testem doświadczalnym dedykowanym dla powłok. Celem wykonanej symulacji było pokazanie różnic pomiędzy modelami, a nie przeprowadzenie symulacji mającej odzwierciedlać określony test doświadczalny.

W trakcie symulacji spęczania wykorzystany został biliniowy model materiału przedstawiony na rysunku 30.

52

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 30 Wykorzystany model materiału.

Zgodnie z modelem pokazanym na rysunku 30 przyjęto dwa rodzaje powłok. Celem pracy nie był konkretny dobór materiałów i ich własności, dlatego wprowadzono tylko oznaczenia powłok i wartości parametrów w wybranym modelu materiału:

·powłoka A : $\sigma_1 = 7636 \text{ MPa}$, $\epsilon_1 = 0.024$, $\sigma_2 = 10350 \text{ MPa}$, $\epsilon_2 = 1$;

·powłoka B : $\sigma_1 = 460 \text{ MPa}$, $\epsilon_1 = 0.024$, $\sigma_2 = 690 \text{ MPa}$, $\epsilon_2 = 0.5$.

Wartości parametrów w modelu materiału powłoki A i B różnią się, co ma miejsce w rzeczywistych układach powłok, w których nakładane są naprzemiennie materiały np. twarde i miękkie, czyli takie których własności są różne. Ma to na celu zatrzymanie propagacji pęknięcia, co jest przedmiotem badań tribologicznych.

Również ułożenie warstw rozdzielono na dwa sposoby:

·A/B/A/B/A

·B/A/B/A/B

53

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Dla tak dobranych założeń otrzymano za pomocą symulacji MES wyniki dla następujących przypadków:

1) Intensywności naprężenia dla układu powłok A/B/A/B/A

a) dla modelu z częściowo zamrożoną relaksacją, rysunek 31;

b) dla modelu z relaksacją, rysunek 32;

W zaprezentowanym układzie w powłokach typu A zauważono duże wartości naprężeń szczególnie uwidaczniają się w miejscach o nieregularnej geometrii.

Rysunek 31 Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu A/B/A/B/A

wygenerowanego przy pomocy algorytmu z częściowo zamrożoną relaksacją

Dlatego w modelu z zamrożoną relaksacją można przypuszczać z pewnym prawdopodobieństwem, że zajdzie zjawisko pęknięcia. Prawdopodobieństwa pęknięcia są szacowane po uwzględnieniu pewnych kryteriów, w których pod uwagę bierzemy m. in. naprężenia. Zastosowanie powłoki B, która charakteryzuje dużą łatwość odkształcenia się powoduje, że pojawiający się w wyniku napyłania gradient struktury obniża wysoki stopień zagrożenia pęknięciami. Zagrożenie pęknięciem jest sytuacją, w której w wyniku użytkowania materiału pojawiają się naprężenia powodujące, że materiał pęka.

54

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 32 Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu A/B/A/B/A wygenerowany przy pomocy algorytmu z relaksacją.

W materiale utworzonym na bazie modelu probabilistycznego naprężenia rozkładają się równomiernie na całości warstwy. Dzięki takiej sytuacji materiał wykazuje mniejsze prawdopodobieństwo pęknięcia.

2) Intensywności naprężenia dla układu powłok B/A/B/A/B

a) dla modelu z częściowo zamrożoną relaksacją, rysunek 33

b) dla modelu z relaksacją, rysunek 34

Przeprowadzona symulacja powłok B/A/B/A/B potwierdza, że w układzie o niesymetrycznej geometrii granicy faz, wartość naprężenia również rozkłada się nierównomiernie. Jak łatwo możemy zauważyć warstwa B, której odkształcenie zachodzi dość łatwo przenosi całość naprężeń na wewnętrzne powłoki typu A, które rozkładając się nierównomiernie powodują pęknięcie materiału w miejscu wystąpienia największego gradientu naprężenia.

Rysunek 33 Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu B/A/B/A/B wygenerowanego przy pomocy algorytmu z częściowo zamrożoną relaksacją.

Rysunek 34 Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu B/A/B/A/B wygenerowanego przy pomocy algorytmu z relaksacją.

Wykorzystanie do badań modelu probabilistycznego, pokazuje, że tak jak w

poprzednim przypadku i w układzie B/A/B/A/B rozkład naprężenia jest bardziej

równomierny.

56

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

3) Porównanie rozkładów intensywności naprężeń i odkształceń w modelu opracowanym w tej pracy oraz standardowym MES modelem bez uwzględnienia nieciągłej granicy pomiędzy powłokami, która jest pochodną procesu ich wzrostu.

c) dla modelu z częściowo zamrożoną relaksacją, rysunek 35;

d) dla modelu z relaksacją, rysunek 36.

Porównanie rozkładu intensywności naprężeń i odkształceń z próby spęczania dla modelu opracowanego w tej pracy i standardowego MES modelu, ukazała pewne wyróżniające się zjawiska. Jak widzimy rozkład naprężeń i odkształceń w standardowym modelu jest bardzo równomierny, natomiast gdy uwzględnimy nieciągłą granicę pomiędzy powłokami to wyniki stają się bardzo nieregularne. Obie symulacje mają pewną wspólną cechę. Główny kierunek rozkładu naprężeń i odkształceń jest podobny.

Rysunek 35 Porównanie rozkładów intensywności naprężeń [MPa] i odkształceń w modelu wygenerowanego przez algorytm z częściowo zamrożoną relaksacją A/B/A/B/A oraz standardowym MES modelem.

57

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 36 Porównanie rozkładów intensywności naprężeń [MPa] i odkształceń w wygenerowanego przez algorytm z częściowo zamrożoną relaksacją B/A/B/A/B oraz standardowym MES modelem.

7.3 Dyskusja

Przeprowadzone symulacje i porównania uświadamiają jak wiele problemów związanych z użytkowaniem i projektowaniem materiałów jest nadal nierozwiązanych. Powstawanie gradientu na granicy układów jest udowodnione i nie podlega dyskusji, ponieważ wiemy jak bardzo nieregularna jest każda powierzchnia tego typu materiału w skali atomowej. Jednakże aktualnie wykorzystywane do badań układów wielopowłokowych standardowe modele okazują się być wystarczające. Wszystko zależy jednak od rozwijanego kierunku badań i poszukiwanych wyników oraz poziomu szczegółowości. Symulacja z nieciągłą granicą pomiędzy powłokami ukazuje tylko i wyłącznie problem, jakim jest szacowanie prawdopodobieństwa pęknięcia na podstawie lokalizacji i wielkości gradientu intensywności naprężenia na granicy pomiędzy

58

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

nanopowłokami. Jednak przy odpowiednim doborze materiałów prawdopodobieństwo zajścia tego zjawiska nie musi być duże.

Rozdział 8

Podsumowanie i wnioski

W pracy przedstawiono wieloskalowy model wzrostu warstw w nanopowłokach o własnościach materiałów gradientowych, oparty na metodzie automatów komórkowych. Jako technikę napyłania nanopowłok zaadaptowano metodę MBE. Pozwoliło to na wyodrębnienie pewnych procesów mających najistotniejszy wpływ na dynamikę wzrostu i na geometrie powstającej warstwy. W kolejnym etapie podjęto pomyślnie zakończoną próbę opracowania założeń i reguł dla opisu badanego zjawiska oraz budowy automatu komórkowego. Opracowanie CA pozwoliło na skonstruowanie modeli MNP, MLM oraz MP. Kolejne modele bazują na tych samych założeniach, natomiast reguły ewoluują od najbardziej prostych w MNP, przez te uwzględniające dyfuzję w MLM, aż do najbardziej złożonych w modelu MP. Ten ostatni bazuje na określeniu prawdopodobieństw zachodzenia pewnych procesów, których pełne poznanie jest trudne i czasochłonne. Na podstawie opracowanych modeli zostało stworzone narzędzie obliczeniowe, które zaimplementowano w języku programowania C++. Na bazie kodu powstała aplikacja, której interfejs został oparty o biblioteki .Net Framework, natomiast narzędzie generowania powłok stworzono w oparciu o standard ISO/ANSI. Interfejs wykorzystujący zaawansowane funkcje ze środowiska .Net udostępnia możliwość wizualizacji wyników w sposób statyczny i dynamiczny. Natomiast przy opracowaniu narzędzia obliczeniowego wykorzystano standardowe biblioteki języka C++ pozwalające w przyszłości na opracowanie aplikacji wieloplatformowej.

Przeprowadzone we własnym oprogramowaniu symulacje, pozwoliły na wykonanie licznych analiz, które były związane ze strukturą powstałej warstwy. Stwierdzono, że dominujące w procesie napyłania procesy takie jak: adsorpcja i dyfuzja powierzchniowa zależą odpowiednio od natężenia strumienia cząstek oraz temperatury podłoża. Wykonano również, zestaw porównań dla generowanych powłok względem zmiany kluczowych parametrów. Zauważono, że całkowite zamrożenie dyfuzji powierzchniowej powoduje powstawanie powierzchni o bardzo nieregularnych kształtach, której morfologia przypomina bardziej rozkład losowy niż efekt zajścia procesu fizycznego. Uaktywnienie dyfuzji cząstek, spowodowało, że w zależności od doboru parametrów można było uzyskać warstwy o mniejszej lub większej chropowatości.

Jednym z celów pracy było również, pokazanie istoty uwzględnienia nieciągłej granicy pomiędzy powłokami w symulacji próby do świadczałnej przeprowadzonej na wygenerowanym materiale, co wykonano na przykładzie próby ściskania. Symulacja odbyła się przy użyciu metody elementów skończonych i przy wykorzystaniu oprogramowania Abaqus. W wyniku czego otrzymano intensywność rozkładu naprężeń i odkształceń w badanym materiale. Porównano otrzymane wyniki z symulacją przeprowadzoną dla powłok bez uwzględnienia nieciągłej granicy między warstwami. Podejście takie pozwoliło na oszacowanie prawdopodobieństwa pęknięcia na podstawie lokalizacji i wielkości gradientu intensywności naprężenia na granicy między warstwami.

Autor niniejszej pracy starał się wyodrębnić najistotniejsze elementy procesu jakim jest wzrost powierzchni. Bardzo rozległa literatura dla badanego zagadnienia ukazuje, jak wiele zjawisk zachodzi w skali nanometrycznej i jak wiele jest w tej dziedzinie do zbadania.

Rozdział 9

Implementacja

Przedstawione w pracy modele zaimplementowano z wykorzystaniem języka C++ oraz platformy programistycznej Microsoft Visual Studio 2008. Autor starał się stworzyć aplikację w pełni obiektową z czytelnym i łatwym w obsłudze interfejsem oraz możliwością wizualizacji prowadzonych badań. W wyniku takiego działania powstały:

1) Pakiet klas i funkcji implementujących narzędzie obliczeniowe generowania nanopowłok przy użyciu standardowego języka C++.

2) „Nano” - aplikacja wykorzystująca bibliotekę Windows Form z platformy .Net 3.5. Udostępnia ona użytkownikowi interfejs graficzny i wizualizacje wyników w dwóch trybach, natomiast obliczenia są prowadzone dla siatki o maksymalnej liczbie cząstek 500x500. Wyniki symulacji są zapisywane w postaci pliku siatki mesh oraz pliku graficznego bmp.

Wyniki w formacie bmp posłużyły jako dane wejściowe dla geometrii, którą wykorzystano do wykonania symulacji MES spęczania materiału. Symulacje MES zostały opracowane w programie Abaqus w Katedrze Informatyki Stosowanej i Modelowania, AGH.

9.1 Środowisko

Główna część programu została zaimplementowana za pomocą języka C++ w standardzie ISO/ANSI. Bazując na klasach w ten sposób opracowanych zaprojektowano aplikację „Nano” wykorzystującą elementy Standardu C++/CLI. Jest to standard

62

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

wprowadzony przez firmę Microsoft i udostępniany razem ze środowiskiem programistycznym .NET, na którym znajduje się maszyna CLR. Kluczowa różnica w standardach polega na tym, że programy pisane w CLI są kompilowane do kodu pośredniego i uruchamiane w locie na maszynie wirtualnej, którą jest właśnie CLR.

Zwiększa to bezpieczeństwo danych i niezawodność kodu. Szczególnie ważną własnością jest to, że dynamiczne przydzielanie i zwalnianie pamięci odbywa się w pełni automatycznie oraz cały kod jest dokładnie sprawdzany i poddawany walidacji przed wykonaniem programu [20,21].

Wykorzystanie środowiska .NET stało się pomocne przy tworzeniu interfejsu graficznego. W szczególności wykorzystano biblioteki Data, Drawing oraz Windows Forms. Ta ostatnia udostępnia interaktywne projektowanie formularzy oraz całą bazę elementów składowych GUI. Autor w miarę możliwości starał się bazować na możliwościach oferowanych przez te biblioteki. Na uwagę zasługują następujące ich elementy :

·Graphics^ - element tworzący scenę prostych, elementarnych rysunków, który udostępnia dla rysowania wszystkie podstawowe figury.

·Bitmap^ - element obsługujący stworzone obiekty Graphics i dający możliwość zapisu do pliku graficznego bmp.

9.2 Struktura wewnętrzna aplikacji

Autor opracowując strukturę aplikacji starał się wykorzystać grupę powszechnie używanych cech języka, takich jak obiektowość oraz projektowanie z wykorzystaniem szablonów. Jak już wspomniano, zostały zastosowane techniki udostępniane zarówno przez natywny C++, jak i ten w standardzie CLR.

Projekt kodu własnego autor podzielił według konwencji przyjętych w ramach programowania zorientowanego obiektowo. Główną częścią aplikacji to klasy wykonujące obliczenia na automatach komórkowych. Schemat wymiany danych między tymi klasami przedstawiono na rysunku 37. Łątwo można zauważyć, że elementy przedstawione na diagramie wnoszą funkcjonalność odpowiednią do

63

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

opracowanych modeli. Szczegółowe omówienie klas zostało przedstawione w dalszej części pracy. W tym miejscu należałoby omówić ich hierarchie.

Rysunek 37 Diagram klas.

Jak widać na rysunku 37, automat jest klasą główną, od której dziedziczą: AutomatMNP, AutomatWV, AutomatPro. To podejście jest kluczowe, ponieważ, pozwala na współdzielenie implementacji. Taki zabieg, mimo tego że jest bardzo ryzykowny i wymaga od programisty sztywnego trzymania się reguł, to jednak w tym przypadku przynosi spore korzyści. Hierarchia klas dziedziczących jest zaprojektowana w sposób odpowiadający kolejności budowy modeli wzrostu. Klasa Automat jest w pewnym sensie abstrakcyjna, i udostępnia wyłącznie interfejs. Natomiast kolejne struktury dziedziczące po Automat implementują już konkretne modele.

Klasa Automat

Klasa Automat zilustrowana na rysunku 38 implementuje siatkę automatu komórkowego. Najważniejsze cele, które zostały przed nią postawione to przede wszystkim udostępnianie interfejsu elementarnych funkcji potrzebnych do operacji na komórkach siatki jak : zmiana stanu komórki, zmiana parametru materiałowego. Za zmiany te odpowiadają funkcje: `setStateAutomat()` oraz `setMaterialAutomat()`. W razie konieczności, a więc gdy dana cząstka się przemieszcza to wyżej wymienione funkcje synchronicznie zmieniają nową lokalizację cząstki jako zajęte, natomiast nowe miejsce jako wolne.

Klasa Cell

Klasa Cell ilustruje działanie jednej komórki w sieci CA. Struktura tej klasy przedstawiona jest na rysunku 39. Jest ona powiązana relacją asocjacji jeden do wielu z klasą Automat, która jak wiemy składa się z wielu komórek. Ponadto jest udostępniany

65

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

podstawowy interfejs funkcji operujących na zmiennych pojedynczych komórek. Również klasy pochodne z Automat z racji dziedziczenia są powiązane w tej samej relacji z Cell.

Rysunek 39 Schemat klasy Cell.

Klasa AutomatMNP, AutomatWV

Zgodnie z przyjętą koncepcją kolejne typy mają za zadanie rozszerzyć funkcjonalność swojej klasy bazowej, o narzędzia potrzebne do wykonania operacji zgodnie z opracowanymi algorytmami wzrostu warstw. Pierwsza z wymienionych klas udostępnia metody, dzięki którym możemy przeprowadzić symulacje nanoszenia przypadkowego. Druga natomiast pozwala na dodatkowe wprowadzenie procesu relaksacji cząstek. Rysunek 40 ilustruje zawartość obu rozpatrywanych klas. Jako kluczowe elementy możemy wymienić:

- funkcja `randomSpaceForCELL(short int)`, odpowiada za proces osadzania i jest zaimplementowana zgodnie z przedstawionym w podrozdziale 6.2 pseudokodem. Fragment kodu własnego został przedstawiony na rysunku 41. Metoda zostaje wprowadzona począwszy od klasy `AutomatMNP` i jest wykorzystywana przez wszystkie kolejne klasy pochodne.

·kontener cellToMove, przechowuje tymczasowe informacje na temat tych komórek, które w danym kroku czasowym mają możliwość zmiany stanu. Cechą tego narzędzia jest to, że może bez przeszkód w trakcie działania przechowywać różną ilość elementów, a co z tego wynika w danym kroku czasowym nie ma znaczenia np. ruch wykona sto czy dwieście cząstek.

66

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Przydzielane dla nich miejsca w pamięci jest w pełni optymalizowane. Kontener zostaje wprowadzony od klasy AutomatWV, co pokazano na rysunku 40 (b).

Rysunek 40 Schemat klasy AutomatMNP

·funkcja modelExpandedFamili, wprowadzona począwszy od klasy AutomatWM, implementuje jeden krok w modelu lokalnego minimum. Fragment kodu własnego zamieszczono na rysunku 42.

67

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

```
void AutomatMNP::randomSpaceForCell(short int nMaterial)
{
    short int randomColumn = rand()%this->getQuantityColumn(); short int lastRow = this->getQuantityRow() -
    1;

    for(short int i = lastRow; i > -1; i-- )
    {
        if(this->getStateAutomat(i,randomColumn) == 0)
        {
            this->setStateAutomat(i, randomColumn, 1); this->setMaterialAutomat(i, randomColumn,
            nMaterial);

            break;
        }
    }
}
```



```
}  
}  
}
```

Rysunek 41 Kod funkcji randomSpaceForCell

```
void AutomatWV::modelExpandedFamili(double ratioDeposition, short int avgQuantityMove, short int  
nMaterialCell, bool condition) {
```

```
Coordinate cellOld, cellNew;
```

```
short int quantityCellOneStep = (short int)(this-  
>getQuantityColumn() * ratioDeposition);
```

```
for(int i = 0; i < quantityCellOneStep; i++)  
{  
this->randomSpaceForCell(nMaterialCell);  
}
```

```
this->paintState();
```

```
this->findCellToMove(false);
```

```
for(int i = 0; i < (avgQuantityMove*this->sizeCellToMove()); i++)
```

```
{  
if(this->sizeCellToMove() != 0)  
{
```

```
cellOld = this->randCellToMove(); this->choiseDirectionAndMove(cellOld, condition);
```

```
}  
}
```

```
this->deleteAllCellToMove();
```

```
}
```

Rysunek 42 Kod funkcji modelExpandedFamili

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Klasa AutomatPRO

Klasa AutomatPro przedstawiona na rysunku 43, jest finalnym produktem uzyskanym w aplikacji. W efekcie dziedziczenia posiada ona wszystkie atrybuty i funkcje z klas pochodnych począwszy od Automat. Dodatkowo część metod z klasy AutomatWV została przeładowana, tak aby uzyskać funkcjonalność odpowiednią do implementowanego modelu.

Rysunek 43 Schemat wewnętrzny klasy AutomatPRO

Kluczowe elementy tej klasy to w szczególności :

- rodzina funkcji `probalityScena()`, są odpowiedzialne za określanie prawdopodobieństw kierunków, w których dana cząstka wykonuje ruch.

- przeładowanie funkcji: `findCellToMove()`, `choiseDirectionAndMove()`, `modelExpendedFamili()`. Zabieg ten polega na uaktualnieniu implementacji względem zmian jakie zachodzą w regułach przejścia dla modelu

probabilistycznego. Fragment kodu własnego dla funkcji `choiseDirectionAndMove()` jest zamieszczony na rysunku 44.

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

```
void AutomatPRO::choiseDirectionAndMove(Coordinate nCell, bool
condition, short int relax)
{

if(this->lookForUp(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn()) == 0)
{
Coordinate cellTemp;

short int randTemp = 0;
short int randTemp2 = 0;

if( (this->lookForLeft(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition) && this-
>lookForRightDown(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition)) && (this-
>lookForRight(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition) == 0))

{

randTemp = rand()%100;
if(randTemp < this->probalityScena12(relax))
{
cellTemp = this->moveToRight(nCell);
cellTemp = this->dropCell(cellTemp);

this->addCellToMove(cellTemp);
}
else
{
this->addCellToMove(nCell);
```

```

}
}

else if( (this->lookForRight(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition) && this-
>lookForLeftDown(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition)) && (this-
>lookForLeft(nCell.getCoordinateRow(), nCell.getCoordinateColumn(), condition) == 0))

{

randTemp = rand()%100;
if(randTemp < this->probalityScena12(relax))
{
cellTemp = this->moveToLeft(nCell);
cellTemp = this->dropCell(cellTemp);

this->addCellToMove(cellTemp);
}
else
{
this->addCellToMove(nCell);
}
}
}

```

Rysunek 44 Fragment kodu funkcji chooseDirectionAndMove

70

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

9.3 GUI

Graficzny interfejs użytkownika został zaimplementowany przy użyciu biblioteki Windows Forms. Głównym jego zadaniem jest interakcja z użytkownikiem, w taki sposób, tak aby mógł on w przejrzysty sposób wprowa

dzać wszystkie wymagane parametry do przeprowadzenia symulacji. Ponadto bardzo istotna w symulacji generacji powłok wizualizacja wyników została opracowana w dwóch trybach:

- wizualizacji statycznej otrzymanych warstw za pomocą mapy bitowej, przedstawiona na rysunku 45.

Rysunek 45 GUI – wizualizacja statyczna

- wizualizacja rosnącej warstwy w czasie rzeczywistym przy użyciu biblioteki Time, przedstawiona na rysunku 46. Jest to bardzo ciekawa cecha tej aplikacji ponieważ, można obserwować każdy etap rosnącej warstwy i jej zmiany w zależności od doboru parametrów. W tym celu wystarczy zaznaczyć pole animacja. Niestety aby zwiększyć wydajność programu w trybie tym została ograniczona wielkość siatki.

71

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

Rysunek 46 GUI – wizualizacja w czasie rzeczywistym

Spis rysunków

1 Ilustracja powstawania nanostruktur metodami top-down i bottom-up (opracowane na podstawie [1]).

2 Zmiany własności w klasycznie połączonych materiałach i materiałach gradientowych (opracowane na podstawie [4]).

3 Schemat reaktora wykorzystywanego w metodzie MBE (opracowane na podstawie [1]).

4 Transport cząstek na powierzchni (opracowane na podstawie [9]).

5 Procesy powierzchniowe .

6 Dyfuzja cząstek po powierzchni (3D).

- 7Wzrost warstwowy (opracowane na podstawie [9]) .
- 8Wzrost wyspowy (opracowane na podstawie [9]).
- 9Wzrost pośredni (opracowane na podstawie [9]).
- 10Modele hierarchiczne i hybrydowe (opracowane na podstawie [13]).
- 11Sąsiedztwo automatu 1D.
- 12Sąsiedztwo automatu 2D (von Neumanna i Moore'a).
- 13Schemat budowy automatu komórkowego dla opracowanych modeli.
- 14Sąsiedztwo Moore'a z zaznaczonymi kierunkami.
- 15Ilustracja procesów zachodzących w automacie.
- 16Ilustracja procesu MNP: (a) sytuacja w czasie t, (b)sytuacja w czasie t+1.
- 17Ilustracja modelu MLM. Częstki wybrane w procesie selekcji.
- 18Reguła przejścia dla MLM. Komórka porusza się w kierunku (a) SE, (b)SW, (c) SE lub SW.

73

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

- 19Selekcja w modelu probabilistycznym.
- 20Scenariusz nr 1 dla MP.
- 21Scenariusz nr 2 dla MP.
- 22Scenariusz nr 3 dla MP.
- 23Scenariusz nr 4 dla MP.
- 24Scenariusz nr 5 dla MP.
- 25Symulacja MNP. Stosunek warstw zew/wew 2:1.
- 26Symulacja MLM. Stosunek warstw zew/wew 2:1.
- 27Symulacja MP. Stosunek warstw zew/wew 2:1.

28Symulacja MP. Stosunek warstw zew/wew 2:1. $\theta = 0,25$. (a) $T = 1$ (b) $T = 5$

(c) $T = 10[s^{-1}]$.

29Symulacja MP. Stosunek warstw zew/wew 2:1. $T = 1$. (a) $\theta = 0.1$ (b) $\theta = 0.25$

(c) $\theta = 0.5$ (d) $\theta = 1 [s^{-1}]$.

30Wykorzystany model materiału.

31Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu A/B/A/B/A wygenerowanego przy pomocy algorytmu z częściowo zamrożoną relaksacją.

32Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu A/B/A/B/A wygenerowany przy pomocy algorytmu z relaksacją.

33Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu B/A/B/A/B wygenerowanego przy pomocy algorytmu z częściowo zamrożoną relaksacją

34Rozkład intensywności naprężenia [MPa] dla układu B/A/B/A/B wygenerowanego przy pomocy algorytmu z relaksacją.

35Porównanie intensywności rozkładów naprężzeń [MPa] i odkształceń w modelu wygenerowanego przez algorytm z częściowo zamrożoną relaksacją A/B/A/B/A oraz standardowym MES modelem.

36Porównanie intensywności rozkładów naprężzeń [MPa] i odkształceń w wygenerowanego przez algorytm z częściowo zamrożoną relaksacją B/A/B/A/B oraz standardowym MES modelem.

37Diagram klas.

74

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

38Schemat klasy Automat.

39Schemat klasy Cell.

40Schemat klasy AutomatMNP.

41Kod funkcji randomSpaceForCell.

42Kod funkcji modelExpandedFamili.

43Schemat wewnętrzny klasy AutomatPRO.

44 Fragment kodu funkcji `choiseDirectionAndMove`.

45 GUI – wizualizacja statyczna.

46 GUI – wizualizacja w czasie rzeczywistym.

Bibliografia

- [1]R. W. Kelsall, I. W. Hamley, M. Geoghegan: Nanotechnologie (ang. Nanoscale science and Technology) Wydawnictwo Naukowe PWN,
Warszawa 2008
- [2]J. Palka: Rudy i metale nieżelazne. Budowa, własności, wytwarzanie i zastosowanie nanomateriałów, 1/2007.
- [3]J. Stobrawa, Z. Rdzawski: Nanomateriały i nanotechnologie. Początek przełomu w inżynierii materiałowej. Rudy i metale R50 2005 nr 6
- [4]K. Hodor, P. Zięba , Olszowska-Sobieraj B.: Inżynieria Materiałowa. Materiały gradientowe jako nowe możliwości współczesnej techniki., 6/1999.
- [5]J. Palka, G. Matula, : Funkcjonalne materiały gradientowe jako sposób łączenia niekomplementarnych własności mechanicznych., PSKN zeszyt nr 13/
- [6]Sz. Hernik, : Projektowanie elementów konstrukcyjnych z materiałów gradientowych., Praca doktorska. Politechnika Krakowska 2009
- [7]I. V Markov: Crystal growth for beginners. Fundamentals of nucleation, crystal growth and epitaxy. 2nd Edition. World Scientific. 2003

[8]Z. Postawa, „Fizyka powierzchni i nanostruktury”, Kraków 2003

[9]http://www.unipress.waw.pl/~stach/wyklad_ptwk_2008/

Podstawy fizykochemiczne budowy struktur krystalicznych o skali makro, mikro i NANO. [online] 15 marca 2010

[10]<http://korek.uci.agh.edu.pl/dydaktyka/fizykapowierzchni.htm> [online]15 marca 2010

76

Wieloskalowy model wzrostu nanopowłok o własnościach materiałów gradientowych

[11]J. Gawęd, Ł. Madej : Zastosowanie automatów komórkowych do wieloskalowej analizy zjawisk w inżynierii metali, Informatyka w Technologii Materiałów, Numer 4, Tom 5, Rok 2005

[12]J. Gawęd : Modelowanie wieloskalowe metodą automatów komórkowych własności materiałów odkształcanych plastycznie., Praca doktorska, AGH 2007

[13]B. Niżnik : Wieloskalowy numeryczny model przemiany austenit – ferryt uwzględniający wpływ wydzieleni węglikoazotków niobu., Praca doktorska. AGH 2008

[14]K. Malarz : Badanie wzrostu powierzchni technika symulacji komputerowej., Praca doktorska, AGH 2000

[15]K. Kułakowski : Automaty Komórkowe., OEN AGH 2 000

[16]<http://www.zis.agh.edu.pl/ak/> [online]15 marca 2010

[17]F. Family, J. Phys. A19 (1986) L441

[18]D.E. Wolf and J. Villain, Europhys. Lett. 13 (1990) 389

[19]S. Das Sarma and P. Tamborenea, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 325

[20]S. Bjornarder, Microsoft Visual C++ Windows Applications by Example, Birmingham 2008

[21]I. Horton, Beginning Visual C++ 2008, Helion 2009

[22]M. Owczarek, Aplikacje w Visual C++ 2005, Helion 2007

