

Marek KUBICA, mkubica@us.edu.pl

Katarzyna KRASIŃSKA, katarzyna.krasinska@tlen.pl

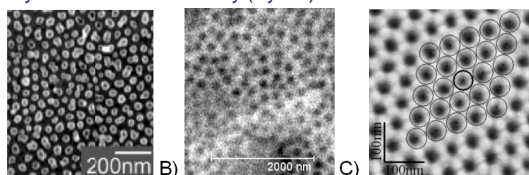
Uniwersytet Śląski, Wydział Informatyki i Nauki o Materiałach



## PROGRAM KOMPUTEROWY SYMULUJĄCY MORFOLOGIĘ NANOCERAMICZNEJ WARSTWY $Al_2O_3$ WYTWARZANEJ W ELEKTROLITACH TRÓJSKŁADNIKOWYCH

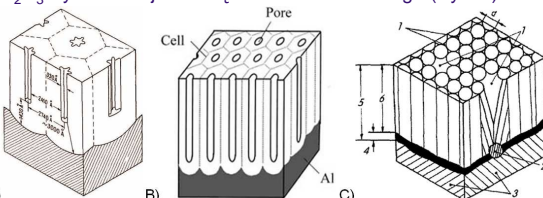
### WPROWADZENIE

Ogólnie przyjętą zasadą jest, że wpływ na wygląd (w konsekwencji na jego właściwości tribologiczne) warstwy tlenkowej ma rodzaj zastosowanego elektrolitu, a także sterowanie parametrami procesu ich wytwarzania takimi jak: gęstość prądu, czas anodowania, temperatura elektrolizy, prędkość mieszania, rodzaj materiału rodzimego. Zdjęcia SEM morfologii warstwy tlenkowej potwierdzają, że ich wygląd zmienia się w zależności od zastosowanych warunków elektrolizy (Rys. 1).



Rys. 1. Zdjęcia SEM morfologii warstwy tlenkowej wytworzonej w zmiennych warunkach anodowania twardego: A)  $H_3PO_4$ , 160V, 276.15 K, B) mieszanina  $(CH_2)_4(COOH)_2$ ,  $H_2SO_4$ ,  $H_2C_2O_4$ , 300A/m<sup>2</sup>, 303.15 K, C) 2.4 M  $H_2SO_4$ , 25V, 281.15 K.

Analiza literaturowa wskazuje na kilka różnych teorii dotyczących wyglądu warstwy  $Al_2O_3$  wytwarzanej metodą anodowania twardego (Rys. 2).



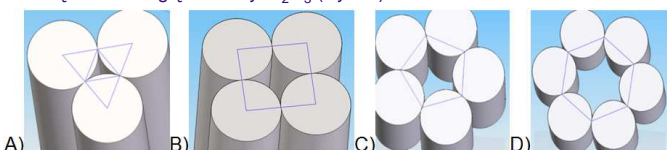
Rys. 2. Modele warstwy  $Al_2O_3$ : A) KHR, B) G. Sulka, C) W. Skoneczny.

### MATERIAŁ I METODY BADAŃ

Warstwa tlenkowa została wytworzona na płycie wykonanej z stopu Aluminium EN AW-5251 o powierzchni  $1 \times 10^{-3} m^2$  i grubości  $4 \times 10^{-3} m$ . Powierzchnię próbki wytrawiono w 5% roztworze kwasu KOH, kolejno zanurzono w 10%  $HNO_3$ . Anodowanie przeprowadzono w elektrolicie SAS (kwas siarkowy, adypinowy i szczawiowy) w temperaturach 293, 303 i 313K dla gęstości prądu 200, 300 i 400 A/m<sup>2</sup> i czasów anodowania 40, 60 i 80 minut. Elektrolit był mieszany z prędkością 150 obr/min. Po zakończeniu procesu anodowania próbki zostały optukane w wodzie destylowanej.

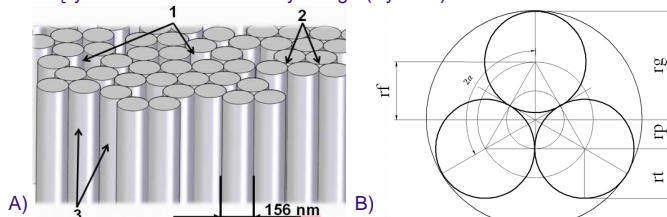
### WYNIKI

Na podstawie otrzymanych zdjęć z mikroskopu skaningowego, a także bazując na teorii Prof. W. Skonecznego (Rys. 2C.) nt. wyglądu warstwy tlenkowej zaproponowano modele 3D możliwego ułożenia włókien, tworzące morfologię warstwy  $Al_2O_3$  (Rys. 3).



Rys. 3. Model kształtów pora: A) trójkąt, B) romb, C) pięciokąt, D) sześciokąt.

Oporając się na wynikach badań warstwy  $Al_2O_3$  zaproponowano model warstwy tlenkowej utworzony w programie CAD (Rys. A4). Na podstawie otrzymanych wyników komputerowej analizy obrazu ustalono bazowe rozwiązanie geometryczne na którym wzorowano się podczas rozwiązywania modelu matematycznego (Rys. 4B).



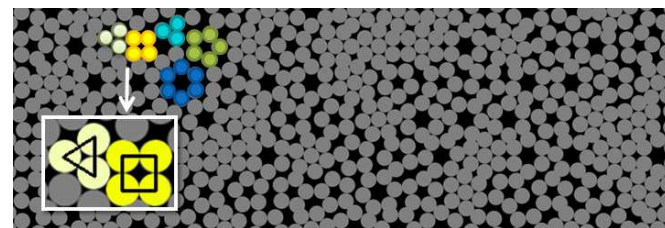
Rys. 4. A) Model warstwy tlenkowej: 1) mikropory, 2) nanopory, 3) włókna; B) Rozwiązanie geometryczne. Oznaczenia:  $2\alpha$  – kąt pomiędzy sąsiednimi średnicami włókien,  $rg$  – promień grupy,  $rp$  – promień pora,  $rt$  – promień włókna,  $r$  – promień figury.

Korzystając z przekształcenia rozwiązania geometrycznego napisano została aplikacja, która ustala: liczbę włókien dla grupy, promień grupy, promień pora, promień włókna, kąt obrotu grupy.

Program został napisany według algorytmu postępowania:

1. Cel: Symulacja morfologii warstwy zoptymalizowanie topografii powierzchni na etapie jej projektowania.
2. Dane: rodzaje ułożenia włókien, KAO zdjęć z SEM.
3. Problem: Program budujący strukturę warstwy tlenkowej.
4. Analiza problemu: Zaprogramowanie grup włókien i ich ułożenia, opracowanie matematyczne, implementacja danych, obiektów, klas.
5. Wynik: Aplikacja symulująca ułożenie włókien w warstwie tlenkowej.

Działanie programu zaczyna się od rysowania grup włókien z punktu 0.0 znajdującego się w lewym górnym rogu okna wynikowego. Obszar rysowania wynosi  $1000 \times 500$  px. Program wykonuje losowy rozkład grup stosując matematyczne przewidywanie zdarzeń za pomocą metody Monte Carlo. Losuje jedną z grup nanoporów w kształcie: trójkąta, pięciokąta lub sześciokąta. Grupa nanoporów czworokątnych tworzona jest z połączenia grup pięć i sześciokątów. Analiza obrazu wykazała 705 pełnych obiektów włókien z których zbudowana jest warstwa  $Al_2O_3$  na ekranie roboczym programu. Wynikiem działania aplikacji jest proponowany obraz morfologii warstwy tlenkowej (Rys. 5).



Rys. 5. Okno robocze programu Symulacja Ułożenia Włókien (SUW) prezentujące grupę regularnie ułożonych włókien w morfologii warstwy tlenkowej.

### WNIOSKI

Struktura geometryczna powierzchni jest jedną z ważniejszych cech powłoki  $Al_2O_3$  wpływającą w bardzo istotny sposób na jej charakterystykę tribologiczną w skojarzeniach ślizgowych bezsmarowych.

Zaproponowany powstający w programie SUW model komputerowy morfologii warstwy tlenkowej jest próbą odtworzenia realnego układu w programie komputerowym celem lepszego zrozumienia i zobrazowania możliwości rozwiązania badanego zagadnienia. Symulacja wykorzystuje model matematyczny zapisany w postaci programu komputerowego.

Przewidywanie zdarzeń realizowane jest z wykorzystaniem metody Monte Carlo poprzez losowanie wielkości charakteryzujących proces powstawania i ułożenia się włókien warstwy tlenkowej  $Al_2O_3$  wytwarzanej na stopie aluminium w elektrolitach trójskładnikowych dla odpowiednich warunków sterowania procesem.

Model jest uproszczoną wersją rzeczywistego systemu i w przybliżony sposób ilustruje zachodzące procesy. Model konceptualny składa się z szeregu założeń, które redukują badane zagadnienie i rzeczywisty obszar analiz do ich uproszczonych odpowiedników, które są akceptowalne w kontekście celu modelowania i symulacji. Wykorzystano systemy komputerowego wspomaganie ułatwiający i przyspieszający wstępny etap wytwarzania warstwy tlenkowej.

Na etapie projektowania węzłów tarcia maszyn i urządzeń decydujemy o stosowanych materiałach, czy technologii wytwarzania, które mają wpływ na budowę struktury geometrycznej. Przedstawiony program autorski SUW pozwoli na zoptymalizowanie topografii powierzchni na etapie jej projektowania, a tym samym umożliwi wybór technologii jej kształtowania w procesie wytwarzania i zoptymalizowanie już w fazie projektowania konstrukcji pary tribologicznej.

Praca wykonana w ramach projektu „DoktorIS – Program stypendialny na rzecz innowacyjnego Śląska”