

TÓM TẮT NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

Họ & tên NCS : Lê Văn An MSNCS: 13252010302

Thuộc chuyên ngành : Kỹ thuật cơ khí Khoá: 2013

Tên luận án : Nghiên cứu chế tạo và tính toán mô phỏng màng mỏng với nền cacbon giống kim cương có tính chống mòn cao và ma sát thấp

Người hướng dẫn chính : PGS. TS. Bùi Xuân Lâm

Người hướng dẫn phụ : PGS. TS. Lê Hiếu Giang

Tóm tắt những đóng góp mới về lý luận và học thuật của luận án:

- Việc nghiên cứu, chế tạo màng mỏng có nền cacbon giống kim cương (DLC) bằng phương pháp kết hợp phun xạ magnetron và hóa học đã được thực hiện. Phương pháp kết hợp này cho tốc độ phủ màng cao hơn nhiều (gấp 2 lần) so với phun xạ magnetron thuần túy.

- Thông qua việc thiết kế các thí nghiệm, tác giả đã có được các thông số phù hợp để phủ màng có cấu trúc nanocomposite với các hạt tinh thể nano TiC (kích thước từ 2-4 nm) phân tán trong nền vô định hình DLC. Cấu trúc tế vi của màng dễ dàng thay đổi thông qua việc thay đổi mật độ năng lượng của bia Ti.

- Thành phần, cấu trúc tế vi, cơ tính và tính chất ma sát của màng được khảo sát chi tiết bằng các thiết bị chẩn đoán chuyên biệt dùng cho vật liệu có cấu trúc nano. Các màng nanocomposite có độ cứng cao (20-30 GPa), ứng suất nội thấp (1-2 GPa), bám dính lên bề mặt chi tiết phủ rất tốt và hệ số ma sát trong điều kiện không bôi trơn khi trượt với thép rất nhỏ (0,16-0,19). Các thông số này cho thấy màng nanocomposite có nền DLC được chế tạo bằng phương pháp mới vượt trội so với các màng chống mòn thông thường đang được sử dụng như carbide hoặc nitride.

- Trên cơ sở lý thuyết về đo độ cứng nano, lý thuyết biến dạng và phương pháp PTHH, mô hình toán và lưu đồ giải thuật của màng mỏng chịu tải bởi nanoindenter đã được thiết lập. Chương trình tính toán được lập trình bằng Matlab. Các màng nanocomposite có nền DLC được chế tạo trong phần thực nghiệm đã được sử dụng làm đối tượng nghiên cứu để khảo sát độ cứng, phân bố ứng suất, biến dạng và hư hỏng khi chịu tải bởi nanoindenter. Độ chính xác của tính

toán và mô phỏng được đánh giá dựa vào sai số theo chuẩn năng lượng và tốc độ hội tụ. Kết quả có được từ luận án là cơ sở để phát triển các nghiên cứu chuyên sâu về khả năng chịu tải và hư hỏng của màng mỏng ở các chế độ làm việc phức tạp.

Tp. Hồ Chí Minh, ngày 07 tháng 05 năm 2020

Nghiên cứu sinh

(Ký và ghi rõ họ tên)

Lê Văn An

Người hướng dẫn chính

(Ký và ghi rõ họ tên)

Người hướng dẫn phụ

(Ký và ghi rõ họ tên)

SUMMARY OF CONTRIBUTIONS OF THE THESIS

PhD candidate : Le Van An Candidate code: 13252010302
Major : Mechanical Engineering Intake: 2013
Thesis title : Deposition, calculation and simulation of DLC-based thin films with good wear resistance and low friction
Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Bui Xuan Lam
Co-supervisor : Assoc. Prof. Dr. Le Hieu Giang

Summary of theoretical and academic contribution of the thesis:

- The research and producing of diamond-like carbon (DLC) based thin films deposited via a combination method of magnetron sputtering and chemical vapor deposition were carried out. This deposition method gives much higher deposition rates compared to that of magnetron sputtering

- Through experiment design, the deposition parameters, which result in nanocomposite structure with TiC nanocrystals (2-4 nm) embedded in the amorphous matrix of DLC, were determined. The microstructure of the thin films can be modified easily via changing the power density of Ti target.

- Composition, microstructure, mechanical and tribological properties of the deposited thin films were investigated using advanced characterization techniques. Nanocomposite thin films have high hardness (20-30 GPa), low residual stress (1-2 GPa), very good adhesion to the substrate, and low coefficient of friction (0.16-0.19) when sliding against steel counterpart. These excellent properties prove that the DLC nanocomposite thin films deposited via this new method are much better than carbide or nitride thin films, which are being used in tribological applications.

- Basing on the theory of nanoindentation, theory of deformation, and finite element analysis, the mathematical model and algorithm of a thin film loaded by the nanoindenter were built. The programming was carried out with Matlab code. Hardness, stresses distribution, deformation and failure of DLC based nanocomposite thin films deposited in the experiment part were investigated. The accuracy of the calculation and simulation was estimated using the energy

norm and the rate of convergence. The results of this research can be used to develop studies on load-bearing capacity and failure of thin films under complicated working conditions.

Ho Chi Minh City, 07 May 2020

Candidate

Supervisor

Co-supervisor

Chương 1

Giới thiệu chung

1.1. Giới thiệu về hướng nghiên cứu

Hiện nay có nhiều phương pháp nâng cao chất lượng bề mặt để tăng tính chống mòn như tôi hóa bề mặt, hóa nhiệt luyện, phủ màng. Trong các kỹ thuật tôi hóa bề mặt hay hóa nhiệt luyện, nhiệt độ của chi tiết phải được gia tăng đến một ngưỡng nào đó dẫn đến việc phát sinh ứng suất nhiệt làm thay đổi cơ tính của chi tiết. Phương pháp này hầu hết được áp dụng cho thép cacbon. Đối với chi tiết làm bằng kim loại khác cần được làm cứng bề mặt thì những phương pháp này gần như không hiệu quả. Vì vậy, các loại màng chống mòn sẽ là phương án tối ưu để cải thiện các đặc tính cơ học và ma sát của bề mặt chi tiết.

- Mạ điện bằng kim loại thường có chiều dày của lớp mạ thường trong khoảng 0,13-1,27 mm dẫn đến ứng suất nội lớn, khả năng chịu tải kém. Mặt khác, mạ không thể tạo ra các màng phủ có độ cứng cao vì nó không thể tạo ra các loại màng có cấu trúc đặc biệt mà chỉ là các loại màng kim loại nguyên chất.

- Các loại màng ceramic đa tinh thể như MeC, MeN, MeC_xN_y (Me là nguyên tố kim loại) có độ cứng cao, đã được nghiên cứu ứng dụng trong thực tế từ rất lâu, tuy nhiên hệ số ma sát của các loại màng này thường rất lớn (>0,3).

- Màng hợp kim nano tinh thể có cấu trúc phụ thuộc vào hàm lượng và loại nguyên tố thêm vào nguyên tố chính. Các loại màng hợp kim nano có độ cứng cao nhưng không ổn định ở nhiệt độ cao, ứng suất dư lớn và hệ số ma sát của các loại màng này khá lớn.

- Màng có cấu trúc nano nhiều lớp được thiết kế từ hai lớp siêu mỏng trở lên (khoảng 5 – 10 nm) theo một chu kỳ được xác lập. Độ cứng của các loại màng này phụ thuộc rất lớn vào chiều dày của mỗi lớp trong màng nano nhiều lớp. Với các thiết bị phủ công nghiệp việc đảm bảo chiều dày của mỗi lớp ở cấp độ vài nm hầu như không thể thực hiện được, vì vậy, độ cứng và tính chống mài mòn của màng nano nhiều lớp không ổn định. Vấn đề này sẽ được khắc phục khi áp dụng cấu hình màng nano một lớp – nanocomposite.

- Nanocomposite là màng có cấu trúc gồm các hạt nano phân tán trong một nền chất vô định hình nào đó. Cacbon giống kim cương (Diamond Like Carbon, thường được viết tắt là DLC hoặc a-C, hoặc a-C:H (nếu có chứa hydro)) là vật liệu vô định hình bao gồm các cấu trúc sp^3 (giống kim cương) và sp^2 (giống graphite). DLC được biết đến như là vật liệu có tính chống mòn tốt, ma sát thấp (hệ số ma sát nhỏ hơn 0,2) và có thể chế tạo dưới dạng màng mỏng bằng các kỹ thuật phủ vật lý (Physical Vapor Deposition - PVD) hoặc hóa học (Chemical Vapor Deposition - CVD). Tuy vậy, những bất lợi như ứng suất nội cao, dễ vỡ giòn, tính bền nhiệt kém giới hạn các ứng dụng của cacbon giống kim cương. Việc đưa một số kim loại vào nền DLC để tạo nên màng nanocomposite sẽ vẫn giữ được các tính chất ưu việt của DLC đã được chứng minh, đồng thời, khắc phục những nhược điểm của nó. Nanocomposite với nền DLC là vật liệu rất tiềm năng cho các ứng dụng chống ma sát và mài mòn các chi tiết chuyển động.

1.2. Mục đích nghiên cứu

- Trong luận án này, màng mỏng nanocomposite được thiết kế, chế tạo với các tinh thể TiC phân tán trên nền vô định hình DLC bằng phương pháp phún xạ magnetron kết hợp hóa học. Sự kết hợp giữa PVD và CVD là một phương pháp mới trong công nghệ phủ màng nanocomposite có nền DLC.

- Thiết kế thí nghiệm phủ màng bằng phương pháp PVD kết hợp với CVD được thực hiện theo phương pháp Taguchi. Cấu trúc và các tính chất của màng được nghiên cứu bằng các thiết bị chẩn đoán và thí nghiệm hiện đại áp dụng cho vật liệu nano.

- Sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn để tính toán, mô phỏng quá trình màng chịu tải bởi đầu đâm nano (nanoindenter) nhằm xác định sự thay đổi về ứng suất, biến dạng và hư hỏng của màng cho phép hiểu rõ hơn về các đặc tính và khả năng chịu tải của màng. Độ chính xác của lời giải được đánh giá thông qua chuẩn sai số về năng lượng biến dạng và tốc độ hội tụ. Những kết quả có được là tiền đề cho những nghiên cứu sâu hơn về khả năng chịu tải của màng mỏng ở các điều kiện phức tạp hơn như ma sát, ảnh hưởng của nhiệt hoặc màng phủ trên để có tính chất cơ học khác nhau.

1.3. Giới hạn nghiên cứu

- Màng mỏng nanocomposite có nền DLC được phủ trên đế Si và thép, sau đó dùng các thiết bị chuyên biệt để xác định cấu trúc, các tính chất cơ học và ma sát của màng.

- Việc tính toán trường chuyển vị, biến dạng, ứng suất khi màng chịu tải được thực hiện trên mô hình 2D.

- Trong quá trình màng chịu tải bởi đầu đâm nanoindenter ảnh hưởng của ma sát và nhiệt độ được bỏ qua, ma trận độ cứng k không đổi.

- Các hạt nano được xem như phân bố đều trong nền vô định hình DLC.

1.4. Kế hoạch nghiên cứu

Để thực hiện công trình nghiên cứu, tác giả đã nghiên cứu và giải quyết các vấn đề có liên quan và trình bày trong các chương như sau:

Chương 1: Giới thiệu chung

Chương 2: Tổng quan về màng mỏng và các phương pháp chế tạo

Chương 3: Chế tạo màng mỏng có nền cacbon giống kim cương phủ bằng phương pháp phun xạ magnetron kết hợp hóa học

Chương 4: Các tính chất cơ học và ma sát của màng mỏng có nền cacbon giống kim cương phủ bằng phương pháp phun xạ magnetron kết hợp hóa học

Chương 5: Tính toán và mô phỏng màng nanocomposite có nền cacbon giống kim cương chịu tải bởi nanoindenter

Chương 6: Kết luận và hướng phát triển tiếp theo của đề tài

1.5. Những đóng góp của luận án

Về lý thuyết:

- Thiết kế thí nghiệm, xác định thông số chế tạo màng mỏng DLC, màng nanocomposite với các hạt tinh thể nano phân tán trên nền vô định hình DLC. Màng có độ cứng cao, ứng suất dư thấp, có khả năng bám dính tốt và hệ số ma sát thấp phù hợp cho ứng dụng chống mòn.

- Màng được chế tạo bằng phương pháp cùng phun xạ magnetron các bia graphite và Ti trong điều kiện có C_2H_2 , phương pháp kết hợp này (giữa PVD và CVD) cho thấy hiệu quả trong việc chế tạo màng nanocomposite có nền DLC với tốc độ phủ cao. Việc điều chỉnh cấu trúc tế vi

có thể thực hiện dễ dàng thông qua điều chỉnh mật độ năng lượng trên bia Ti (từ đó, điều chỉnh hàm lượng nguyên tử Ti trong màng).

- Sử dụng hiệu quả các thiết bị chẩn đoán cao cấp để xác định cấu trúc tế vi, các tính chất cơ học và ma sát của màng mỏng có cấu trúc nano.

- Xây dựng được lý thuyết tính toán, mô hình và lưu đồ giải thuật của màng mỏng chịu tải bởi nanoindenter. Chương trình tính toán được lập trình bằng phần mềm Matlab. Độ chính xác của lời giải được đánh giá thông qua chuẩn sai số theo chuẩn năng lượng biến dạng và tốc độ hội tụ.

Về thực tiễn:

- Chế tạo được màng mỏng nanocomposite với tốc độ phủ cao. Màng có tính chống mòn tốt, ma sát thấp, tự bôi trơn, có thể ứng dụng rộng rãi cho các chi tiết máy chuyển động có ma sát trong điều kiện bôi trơn kém hoặc không bôi trơn.

- Việc tính toán và mô phỏng trường ứng suất và biến dạng bên trong màng mỏng khi chịu tải bởi nanoindenter được thực hiện, từ đó xác định khả năng chịu tải và sự hư hỏng của màng. Chương trình tính toán, mô phỏng có thể được dùng trong giảng dạy, nghiên cứu, xác định cơ tính của vật liệu mới dạng màng mỏng.

Chương 2

Tổng quan về màng mỏng và các phương pháp chế tạo

2.1. Tổng quan về màng mỏng và màng mỏng có cấu trúc nano

Màng mỏng có thể ở dạng rắn hoặc dạng lỏng, trong đó một kích thước rất nhỏ so với hai kích thước còn lại. Thông thường màng mỏng có độ dày từ vài nm đến vài μm . Màng mỏng có cấu trúc nano khác với màng mỏng có độ dày nano. Màng mỏng có cấu trúc nano có thể dày đến vài μm nhưng trong cấu trúc của nó có các phần tử có kích thước nano. Ví dụ, màng nano nhiều lớp gồm nhiều lớp có chiều dày cỡ nm hoặc màng nanocomposite gồm các hạt nano phân tán trong một chất nền nào đó.

2.2. Phủ hoá học (CVD)

Phủ hoá học sử dụng khí như là một nguồn của vật liệu cần phủ lên chi tiết. Ví dụ: muốn phủ một lớp DLC lên bề mặt một chi tiết người ta sử dụng nguồn cacbon là khí hydro-cacbon (như CH_4 , C_2H_2 , ...). Có nhiều kỹ thuật phủ bằng phương pháp CVD như: CVD nhiệt, CVD plasma (PECVD).

2.3. Phủ vật lý (PVD)

PVD là phương pháp phủ màng lên chi tiết cần phủ bằng việc nguyên tử hoá các phần tử từ một nguồn vật liệu (rắn). PVD gồm các kỹ thuật sau: bốc hơi PVD, Kỹ thuật phun xạ PVD (sputtering PVD). Trong kỹ thuật phun xạ kết hợp từ trường (magnetron) và tần số radio (RF-13,6 MHz) được luận án sử dụng để chế tạo màng.

2.3. Cơ chế hình thành và phát triển của màng phủ bằng phương pháp phun xạ

Các nguyên tử bị phun xạ đến bề mặt để trở thành các phần tử có liên kết yếu. Sau đó nguyên tử khuếch tán vào lớp trước hoặc chuyển động trên bề mặt của màng tùy thuộc vào năng lượng gia tốc đến. Các nhóm nguyên tử trên bề mặt màng sẽ phát triển lớn dần và từng nhóm nguyên tử nhập vào nhau tạo thành các tinh thể vật liệu đơn lẻ tiếp tục phát triển và tổ hợp với nhau để tạo thành các hạt tinh thể. Các hạt sẽ phát triển lớn dần cho đến khi vùng biên giới giữa các hạt cản cản sự phát triển của hạt tinh thể. Vì vậy, cấu trúc tế vi của màng phụ thuộc rất nhiều vào năng lượng của các nguyên tử hoặc ion bay đến màng, phụ thuộc vào năng lượng các nguyên

tử vừa lắng đọng trên bề mặt màng, áp suất buồng phủ (áp suất càng lớn thì năng lượng các hạt đến đế càng nhỏ do va chạm và ngược lại), năng lượng của bia, thế điện âm trên đế.

2.4. Ứng suất dư của màng mỏng

Màng mỏng dù được phủ bằng phương pháp vật lý hay hóa học đều là kết quả của sự oanh tạc của các nguyên tử lên đế, cho nên việc xuất hiện ứng suất dư là điều không tránh khỏi, đặc biệt đối với màng phủ bằng phương pháp vật lý. Ứng suất dư đóng vai trò quan trọng trong tính bám dính và tính chống mài mòn của màng. Ứng suất dư gồm có 3 phần: ứng suất nhiệt (do sự khác biệt về hệ số giãn nở nhiệt giữa đế và màng); ứng suất phát sinh khi màng phát triển hình thành từ sự thay đổi tính sít chặt trong các phần tử của màng khi màng đang phát triển dưới sự oanh tạc của ion và nguyên tử. Những hạt ion hoặc nguyên tử có năng lượng càng cao dẫn đến ứng suất hình thành khi màng phát triển càng lớn; ứng suất phát sinh sau khi màng đã phủ lên đế do ảnh hưởng của môi trường xung quanh.

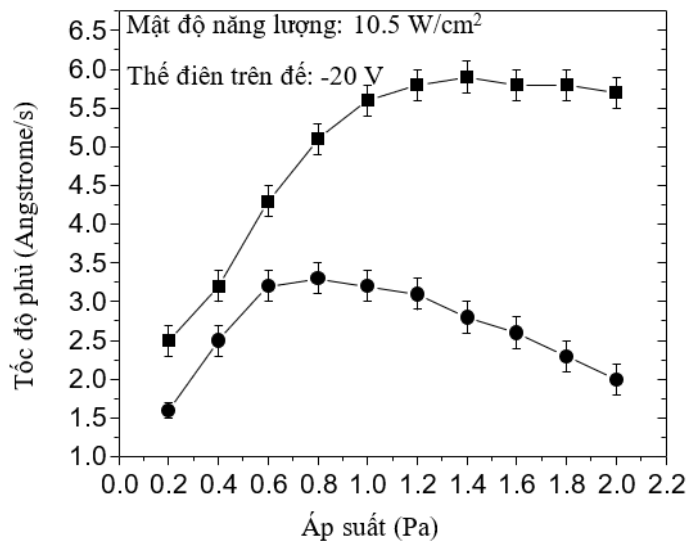
Chương 3

Chế tạo màng mỏng có nền cacbon giống kim cương bằng phương pháp phún xạ magnetron kết hợp hóa học

Các màng có nền cacbon giống kim cương được chế tạo trên hệ thống E303A phún xạ magnetron (Penta Vacuum).

3.1. Màng mỏng cacbon giống kim cương

Hệ số phún xạ của cacbon rất thấp, vì vậy, tốc độ phủ màng DLC bằng phún xạ magnetron thấp. Một số tác giả đã trộn các nguyên tố khác vào bia graphite để tăng hệ số phún xạ của cacbon, tuy nhiên, màng DLC có được sau khi phủ sẽ bị lẫn các chất đưa vào. Trong nghiên cứu này, để tăng tốc độ phủ, khí C_2H_2 được đưa vào buồng phủ. Việc đưa C_2H_2 vào buồng phủ làm tăng tốc độ phủ một cách đáng kể nhờ có sự kết hợp cả hai quá trình phủ vật lý (phún xạ) và hóa học diễn ra trên đế.



Hình 3.1. Tốc độ phủ của màng DLC ở các áp suất phủ từ 0.2 đến 2.0 Pa khi có và không có C_2H_2

Từ hình 3.1 có thể thấy khi phủ màng DLC không có C_2H_2 thì tốc độ phủ lớn nhất đạt khoảng $3,2 \text{ Å/s}$ khi áp suất buồng phủ ở khoảng 0,8 Pa. Khi đưa khí C_2H_2 vào buồng phủ thì tốc độ phủ màng DLC tăng rất mạnh. Đặc biệt, khi áp suất buồng phủ tăng từ 0,2 đến 1,2 Pa, tốc độ phủ tăng mạnh từ 2,5 đến $5,6 \text{ Å/s}$. Và duy trì tốc độ phủ được duy trì ở khoảng 5,5 - 6 Å/s khi

áp suất phủ tăng từ 1,2 đến 2 Pa. Có thể thấy rằng, việc đưa C₂H₂ vào buồng phủ làm tăng tốc độ phủ lên gần gấp 2 lần.

3.2. Chế tạo màng mỏng có nền DLC

Màng mỏng có nền DLC được chế tạo bằng phương pháp phun xạ magnetron 2 bia cacbon và Ti cùng lúc trong plasma Ar (40 cm³/phút) có khí C₂H₂ (10 cm³/phút). Áp suất buồng phủ được duy trì không đổi ở giá trị 0,8 Pa. Mật độ năng lượng trên bia graphite được giữ không đổi là 10,5 W/cm² còn mật độ năng lượng trên bia Ti được điều chỉnh nhằm tạo màng với các cấu trúc tế vi và tính chất khác nhau. Thế điện âm trên đế là 120V được lựa chọn khi chế tạo màng nanocomposite.

3.2.1. Thành phần của màng

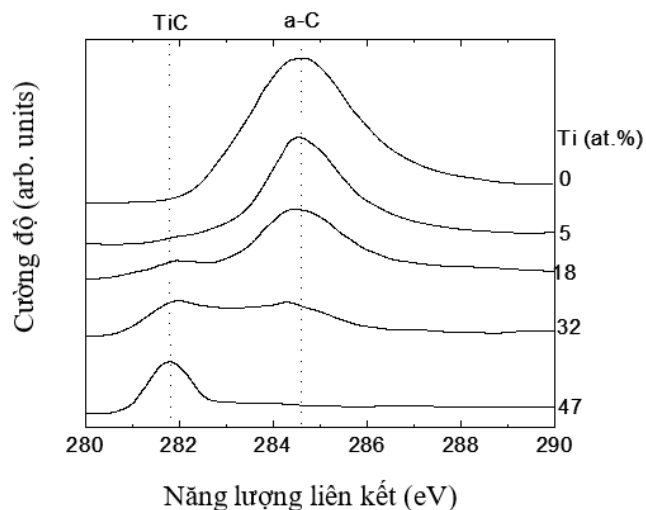
Thành phần màng được xác định bằng thiết bị XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy) với Kratos-Axis spectrometer, nguồn tia X Al K α (1486.71 eV, 15 kV/10 mA). Bảng 3.1 thể hiện thành phần của màng phụ thuộc vào mật độ năng lượng trên bia Ti.

Bảng 3.1. Hàm lượng at.% của Ti và C trong màng thay đổi theo mật độ năng lượng trên bia Ti

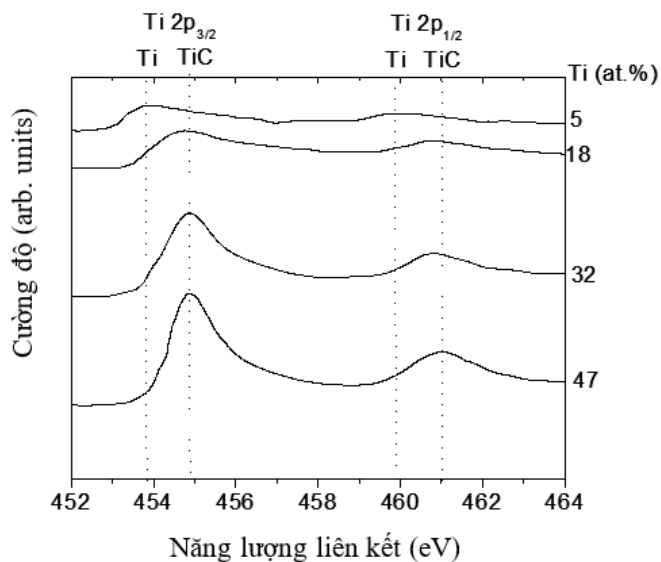
Mật độ năng lượng trên bia Ti (W/cm ²)	Ti (at.%)	C (at.%)
0	0	100
1	5	95
2	18	82
3	32	68
4	47	53

Các đỉnh C 1s và Ti 2p_{3/2} cho phép phân biệt các pha tồn tại trong màng: C, TiC và Ti. Vị trí C 1s thể hiện liên kết C-C trong cacbon vô định hình (tại 284,6 eV) và C-Ti trong TiC (tại 281,8 eV). Đỉnh Ti 2p_{3/2} của Ti trong TiC tại vị trí 454,9 eV và của Ti tại vị trí 453,8 eV.

Phổ XPS của màng nanocomposite có nền cacbon giống kim cương được thể hiện trên hình 3.3 và hình 3.4.



Hình 3.2. Phổ XPS C 1s của màng Ti-DLC ở các hàm lượng



Hình 3.3. Phổ XPS Ti 2p của màng Ti-DLC ở các hàm

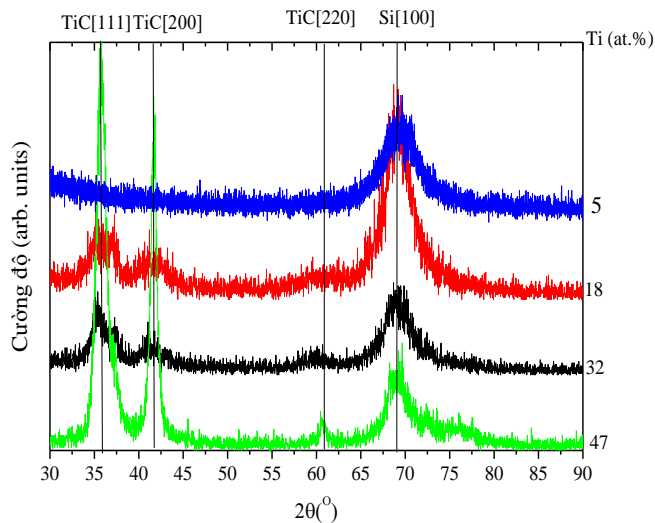
Từ hình 3.2 và hình 3.3, có thể thấy rằng ở hàm lượng Ti 5 at.%, chưa có liên kết Ti-C, hay nói cách khác là chưa có TiC trong màng, lúc này Ti tồn tại trong màng như một pha độc lập. Từ hàm lượng Ti 18 at%, trở lên, toàn bộ Ti đã liên kết với C để hình thành TiC và không có Ti độc lập trong màng. Ở 32 at% Ti, TiC cùng tồn tại với a-C:H nhưng khi hàm lượng Ti đạt đến 47 at.%, gần như không còn có sự tồn tại của a-C:H mà toàn bộ C đã liên kết với Ti để tạo thành TiC. Lúc này, màng có thể được xem là màng TiC.

3.2.2. Cấu trúc của màng

Để xác định sự tồn tại của tinh thể TiC trong màng, phổ nhiễu xạ tia X với góc tới nhỏ (GIXRD) được thực hiện trên máy Philips PW-1710 40 kV/30 mA với nguồn tia X $\text{CuK}\alpha=0.15406\text{nm}$). Kích thước tinh thể được ước lượng bởi công thức Debye-Scherrer:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos(\theta)} \quad [\text{nm}] \quad (3.1)$$

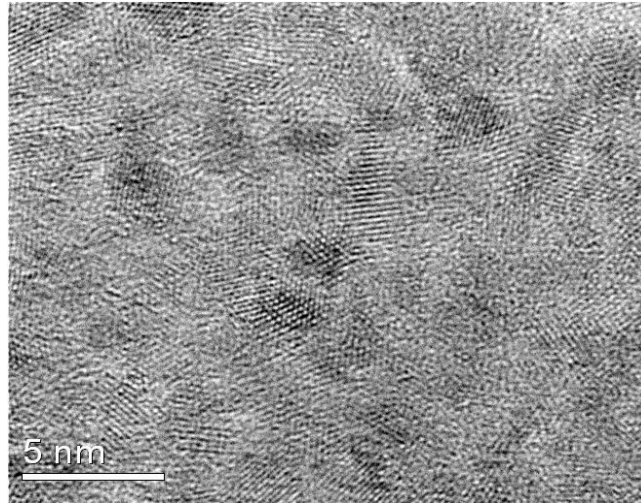
Trong đó D là kích thước trung bình của tinh thể, $K=0.91$ là hằng số, λ là bước sóng tia X, β tính bằng radian là góc tương ứng với bề rộng của phổ tại một nửa cường độ của đỉnh tín hiệu nhiễu xạ, θ là góc nhiễu xạ Bragg.



Hình 3.4. Phổ nhiễu xạ tia X của màng ở các hàm lượng

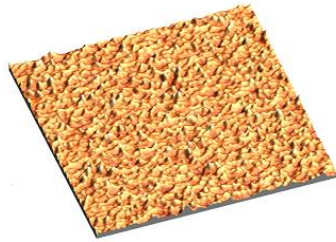
Từ hình 3.4 cho thấy vị trí các đỉnh tương ứng với tinh thể TiC [111], TiC [200] và TiC [220] lần lượt là 35.9, 41.7, và 60.4° 2θ , vị trí đỉnh ứng với Si [100] (vật liệu của đế) là 69,8° 2θ . Ở hàm lượng Ti 5 at.%, chỉ duy nhất đỉnh Si[100] tồn tại, nghĩa là không có tinh thể TiC trong màng. Ở hàm lượng 18 at.%Ti, ngoài đỉnh Si[100], các đỉnh tương ứng với TiC [111] và TiC [200] xuất hiện, điều này chứng minh sự tồn tại của các tinh thể TiC trong màng. Ở các hàm lượng 32 và 47 at.%Ti, ngoài các đỉnh của TiC [111] và TiC [200], đỉnh tương ứng với TiC [220] cũng có thể quan sát được. Từ công thức Debye-Scherrer, kích thước các hạt tinh thể trong màng với 18 và 32 at.%Ti trong khoảng 2-6 nm còn với màng 47 at.%Ti là 4-16 nm. Hình 3.5 đã xác nhận bằng hình ảnh cấu trúc nanocomposite của màng như đã phân tích từ phổ XPS và XRD

cho thấy các tinh thể nano TiC phân tán trong nền vô định hình DLC (a-C:H) theo các hướng khác nhau. Ở hàm lượng 47 at.%Ti, màng có cấu trúc đa tinh thể TiC với kích thước tinh thể khá lớn.

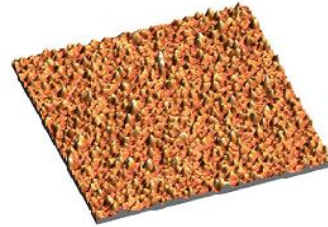


Hình 3.5. Cấu trúc nanocomposite của màng 18at.%Ti được quan sát bằng kính hiển vi điện tử truyền qua TEM

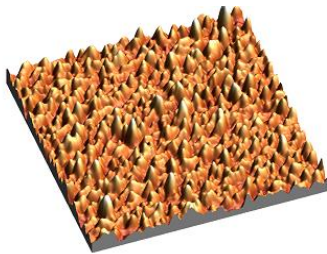
3.2.3. Hình ảnh bề mặt của màng



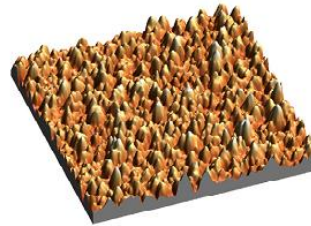
a. $R_a=2.7$ nm



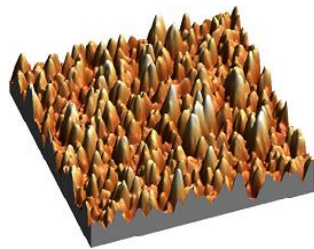
b. $R_a=3.1$ nm



c. $R_a=5.1$ nm



d. $R_a=6.3$ nm



e. $R_a=10.6$ nm

(a)- 0 at.%Ti (màng DLC),

(b)- 5 at.%Ti, (màng chưa có TiC)

(c)- 18 at.%Ti, (màng TiC/a-C:H)

(d)- 32 at.%Ti, (màng TiC/a-C:H)

(e)- 47 at.% (màng TiC)

Hình 3.6. Bề mặt của các màng có được từ kính hiển vi lực nguyên tử (AFM)

Từ hình 3.6 có thể dễ dàng nhận thấy khi hàm lượng Ti càng nhiều thì bề mặt của màng càng nhám hơn (R_a tăng). Với màng DLC, độ nhám đo được là 2,7 nm. Ở hàm lượng 5at.% Ti, chưa có các tinh thể nano TiC, màng vẫn là vô định hình, chưa có nhiều các cụm nguyên tử tạo nên sự lồi lõm trên bề mặt màng, vì vậy, độ nhám chỉ tăng nhẹ, $R_a = 3,1$ nm. Khi hàm lượng Ti đạt từ 18 at.% đến 32 at.%, trong màng có các tinh thể nano TiC, độ nhám tăng lên rõ rệt ($R_a = 5,1$ nm đến 6,3 nm). Đặc biệt, khi không còn a-C:H vô định hình (ở 47 at.%Ti), các đỉnh nhám xuất hiện trên toàn bộ bề mặt màng và độ nhám tăng đến giá trị rất lớn ($R_a = 10,6$ nm). Hiện

tượng tăng độ nhám của màng khi tăng hàm lượng Ti do sự hình thành các tinh thể trong màng và việc giảm năng lượng các ion tới để của các nguyên tử do tăng va chạm.

3.4. Kết luận

- Kết hợp phún xạ và phủ hóa học là phương pháp hiệu quả để chế tạo màng DLC thuần khiết và màng nanocomposite có nền DLC. Đây là phương pháp đơn giản, có tốc độ phủ màng lớn, hiệu quả trong áp dụng ở quy mô công nghiệp.

- Dưới 5 at.%Ti, màng vẫn là vô định hình; trong khoảng 18-32 at.%Ti, màng có cấu trúc nanocomposite với các hạt nano TiC phân tán trong nền vô định hình DLC; ở hàm lượng 47 at.%Ti hoặc lớn hơn, màng xem như chỉ có các tinh thể TiC.

- Màng nanocomposite có độ nhám bề mặt trong khoảng 5-6 nm (phủ trên các tấm Si). Độ nhám bề mặt thấp là ưu thế lớn cho loại màng này trong các ứng dụng kỹ thuật, trong đó có các ứng dụng giảm ma sát và chống mòn.

Chương 4

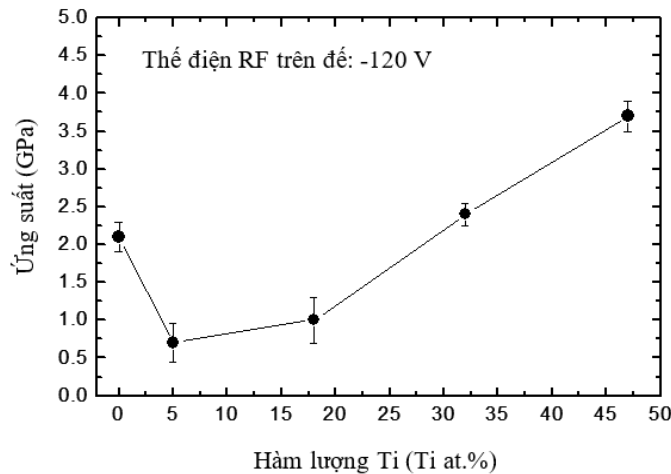
Các tính chất cơ học và ma sát của màng mỏng nc-TiC/a-C:H phủ bằng phương pháp phún xạ magnetron kết hợp hóa học

4.1. Ứng suất dư và tính bám dính

Ứng suất dư của màng được xác định thông qua việc thay đổi bán kính cong của tấm Si [100] có đường kính 100 mm trước và sau khi được phủ màng. Sự thay đổi bán kính cong của tấm Si được xác định bằng máy quét bề mặt laser Tencor. Ứng suất dư trong màng sau khi phủ được xác định từ công thức:

$$\sigma = \frac{E_s}{6(1-\nu_s)} \frac{t_s^2}{t_c} \left(\frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right) \quad [\text{GPa}] \quad (4.1)$$

Trong đó $E_s/(1-\nu_s) = 180,5$ GPa đối với Si [100]), t_s và t_c là chiều dày của tấm Si và của màng, R_1 và R_2 là bán kính cong của Si trước và sau khi phủ màng.

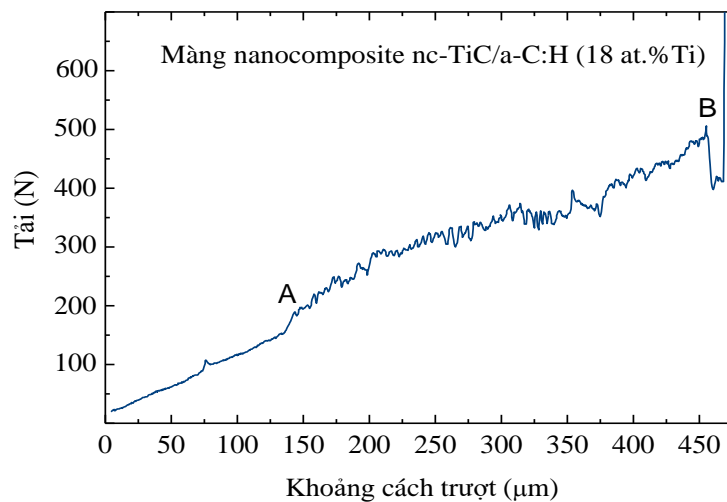


Hình 4.1. Ứng suất dư của màng thay đổi theo hàm lượng Ti

Với màng DLC, ứng suất dư là 2,1 GPa. Ở 5 at.%Ti, ứng suất dư giảm còn 0,7 GPa. Khi hàm lượng Ti là 18 at.%, các tinh thể TiC hình thành, đây là một pha cứng, ứng suất dư khó được giải tỏa hơn nên giá trị ứng suất dư đo được là 1,0 GPa, lớn hơn một chút so với màng 5

at.%Ti. Khi hàm lượng Ti tăng lên đến 32 at.% và 47 at.% ứng suất dư tăng tương ứng đến 2,4 GPa và 3,7 GPa.

Để đánh giá độ bám dính của màng vào đế thép, thí nghiệm trên máy tạo vết xước (Shimadzu SST-101) được tiến hành. Mũi kim cương có bán kính 15 μm được cho trượt trên bề mặt màng. Để có thể quan sát được vết xước dưới kính hiển vi, mũi kim cương được đặt ở chế độ dao động với biên độ 50 μm . Tốc độ tịnh tiến của mũi kim cương là 10 $\mu\text{m/s}$ (mũi kim cương vừa tịnh tiến vừa dao động). Tín hiệu ma sát được chuyển thành tín hiệu điện. Khi màng bị tróc, tín hiệu này thay đổi đột biến, tải ứng với thời điểm này được xem là tải phá hủy màng (hình 4.2).



Hình 4.2. Đồ thị có được từ thí nghiệm vết xước đối với màng nanocomposite 18 at.%Ti

Kết quả thí nghiệm vết xước đối với màng nanocomposite nc-TiC/a-C:H (18 at.%Ti) được thể hiện trên hình 4.2. Màng DLC thuần khiết và màng vô định hình Ti-DLC (5 at.%Ti) đều có tải phá hủy từ 300 N đến 350 N. Các màng có cấu trúc nanocomposite (18 at.% Ti và 32 at.%Ti) có tính bám dính tốt nhất (đều trên 450 N) ở tất cả các lần thí nghiệm. Màng TiC (47 at.%Ti), tải phá hủy nhỏ hơn 200 N.

4.2. Độ cứng và mô đun đàn hồi của màng

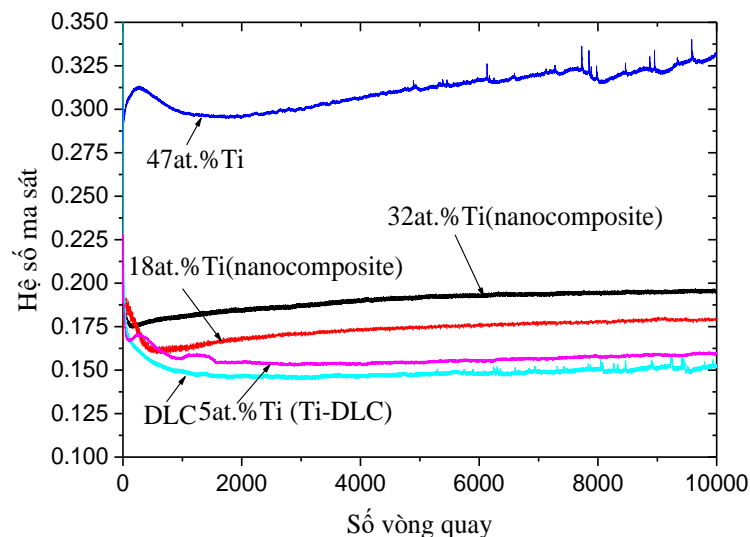
Với màng có chứa 5 at.%Ti, độ cứng và mô đun đàn hồi giảm còn 14 GPa (153 GPa). Việc đồng phún xạ Ti làm giảm năng lượng các nguyên tử (ion) gia tốc đến màng, đồng thời, các tinh

thể cứng TiC chưa được hình thành nên độ cứng của màng bị giảm. Các màng có cấu trúc nanocomposite (18 at.%Ti và 32 at.% Ti) có độ cứng và mô đun đàn hồi lần lượt là 22 GPa (241 GPa) và 28 GPa (272 GPa), đây là giá trị lý tưởng làm màng phủ bảo vệ cho các chi tiết máy chịu ma sát. Với màng TiC (47 at.%Ti), độ cứng và mô đun đàn hồi là 35 GPa (325 GPa).

4.3. Tính chất ma sát và mòn của màng

Tính chất ma sát và mòn của màng được nghiên cứu bằng máy thử ma sát (CSEM) với cấu hình bi trượt trên đĩa. Màng được phủ trên các đĩa thép 440C (đường kính 55 mm, bề dày 5,5 mm, độ bóng đến $R_a=60$ nm), bi được sử dụng trong thí nghiệm làm từ thép AISI 52100 (100Cr6) có đường kính 6 mm, độ nhám bề mặt $R_a=30$ nm, độ cứng 8 GPa. Các thí nghiệm được thực hiện ở nhiệt độ 22°C, độ ẩm không khí 75% trong điều kiện không bôi trơn. Tốc độ trượt được đặt ở giá trị không đổi là 20 cm/s, tải tác dụng 5 N.

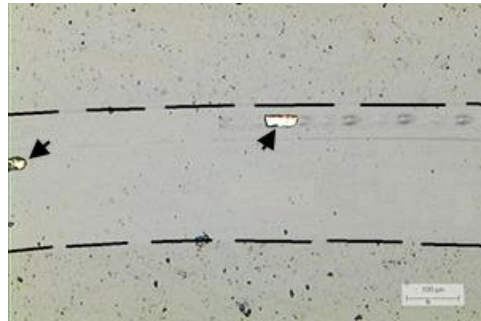
Từ hình 4.3 có thể thấy màng 47at.%Ti có hệ số ma sát lớn hơn 0,3 và không ổn định ở giai đoạn cuối của quá trình thử. Màng DLC thuần khiết và 5at.%Ti có hệ số ma sát thấp nhất (0,15-0,16). Tuy nhiên, ở giai đoạn cuối của quá trình thử (từ 9000 vòng), có thể thấy rõ sự dao động của hệ số ma sát của màng DLC. Các màng nanocomposite có hệ số ma sát cao hơn một chút nhưng cũng ở mức rất thấp (0,16-0,19) và hoàn toàn không có sự dao động của hệ số ma sát.



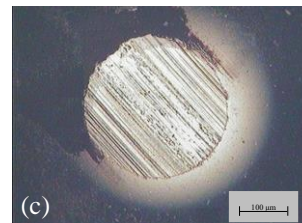
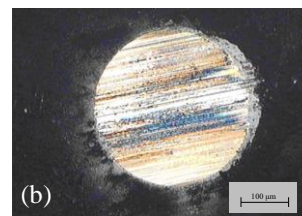
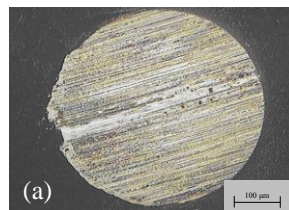
Hình 4.3. Hệ số ma sát của màng khi trượt với bi thép 100Cr6

Tính bám dính của màng DLC và màng DLC có Ti (5at.%Ti) tốt hơn của màng TiC (47at.%Ti). Tuy nhiên màng DLC vẫn có ứng suất nội lớn (2.1 GPa) nên ở giai đoạn cuối của quá trình ma sát, sự dao động của hệ số ma sát có thể quan sát được (các mảnh tróc từ màng tồn tại ở vùng tiếp xúc ma sát). Điều này chứng tỏ tính chống vỡ giòn kém của màng DLC. Các màng nanocomposite có độ bám dính tốt, và đều có nền a-C đủ để hình thành lớp bôi trơn rắn graphite trong quá trình ma sát hệ. Một số vết bong tróc nhỏ quan sát dưới kính hiển vi quang học trên vùng ma sát trượt của màng TiC.

Độ mòn của bi trượt trên màng cũng là một thông số quan trọng để đánh giá chất lượng của màng. Để đánh giá độ mòn của bi, các vết mòn trên bi được quan sát dưới kính hiển vi quang học (hình 4.5).



Hình 4.4. Các vết bong tróc trên vùng ma sát của màng TiC (47at.%Ti) sau khi trượt 10000 vòng với bi 100Cr6



- (a) Vết mòn trên bi trượt với màng TiC
- (b) Vết mòn trên bi trượt với màng DLC thuần khiết
- (c) Vết mòn trên bi trượt với màng nanocomposite (18at.%Ti)

Hình 4.5. Vết mòn trên bi trượt trên các màng

Vết mòn hình tròn có thể dễ dàng ước lượng lớn nhỏ thông qua đường kính của vết. Vết mòn của bi trượt trên màng TiC (47at.%Ti) là lớn nhất do nhấp nhô bề mặt lớn, không có lớp bôi trơn rắn graphite và sự bong tróc một phần của màng trong quá trình trượt tương đối với bi tạo ra các hạt mài. Các hạt này tồn tại ở vị trí tiếp xúc của hai bề mặt ma sát dẫn đến hậu quả bề mặt bi bị mài mòn nhanh chóng (hình 4.5a). Đường kính vết mài của bi trượt trên bề mặt màng DLC thuần khiết (hình 4.5b) nhỏ hơn rất nhiều so với vết tạo ra bởi màng TiC, tuy nhiên, vẫn lớn hơn vết mòn trên bi trượt với màng nanocomposite (18at.%Ti) (hình 4.5c). Dù DLC có bề mặt nhẵn, có lớp bôi trơn rắn được hình thành do sự graphite hóa a-C nhưng do bị tính chống vỡ giòn kém dẫn đến vết nứt vỡ tế vi dẫn đến việc bi bị mài mòn nhanh.

4.4. Kết luận

- Màng nanocomposite với cấu hình các hạt nano TiC phân tán trong nền vô định hình DLC (hàm lượng at%Ti trong khoảng 18-32) có ứng suất dư tương đối thấp (1-2,4 GPa) và tính bám dính trên đế hơn hẳn các loại màng DLC thuần khiết và TiC (tải phá hủy trong thí nghiệm bám dính >450 N so với <350N của DLC và <200N của TiC).

- Khi hàm lượng Ti chưa đủ lớn để hình thành các tinh thể nano TiC thì việc thêm Ti làm giảm độ cứng và mô đun đàn hồi của màng. Tuy nhiên, khi đã hình thành các tinh thể nano TiC thì độ cứng của màng tăng lên khi có thêm Ti. Độ cứng và mô đun đàn hồi của màng TiC (47 at.%Ti) là lớn nhất (35 và 325 GPa), tuy nhiên độ cứng cao đi kèm với độ nhám bề mặt lớn sẽ không tốt cho các ứng dụng giảm ma sát và mài mòn. Màng nanocomposite có độ cứng và mô đun đàn hồi trong khoảng 22-28 GPa và 241-272 GPa, kết hợp với độ nhám bề mặt thấp và tính chống vỡ giòn, tính bám dính tốt cho thấy đây là loại màng rất phù hợp cho các ứng dụng kỹ thuật.

- Hệ số ma sát của màng nanocomposite khi trượt trên bi thép ở chế độ không bôi trơn trong khoảng 0,16-0,19. Đây là giá trị lý tưởng cho các ứng dụng kỹ thuật. Các màng nanocomposite vẫn bám dính tốt trên bề mặt đế sau 10000 vòng quay trên máy ma sát (trong khi màng DLC và TiC cho thấy có những vết tróc). Ngoài ra, độ mòn của bi thép khi trượt trên màng nanocomposite nhỏ hơn rất nhiều so với khi trượt trên màng DLC thuần khiết và màng TiC.

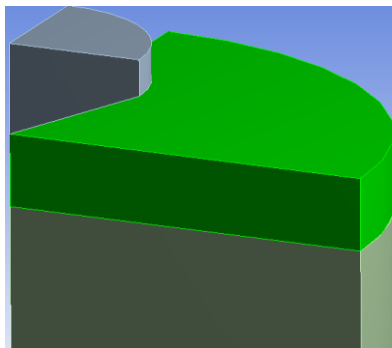
Chương 5

Tính toán và mô phỏng màng nanocomposite có nền cacbon giống kim cương chịu tải bởi nanoindenter

5.1. Mô hình toán màng chịu tải

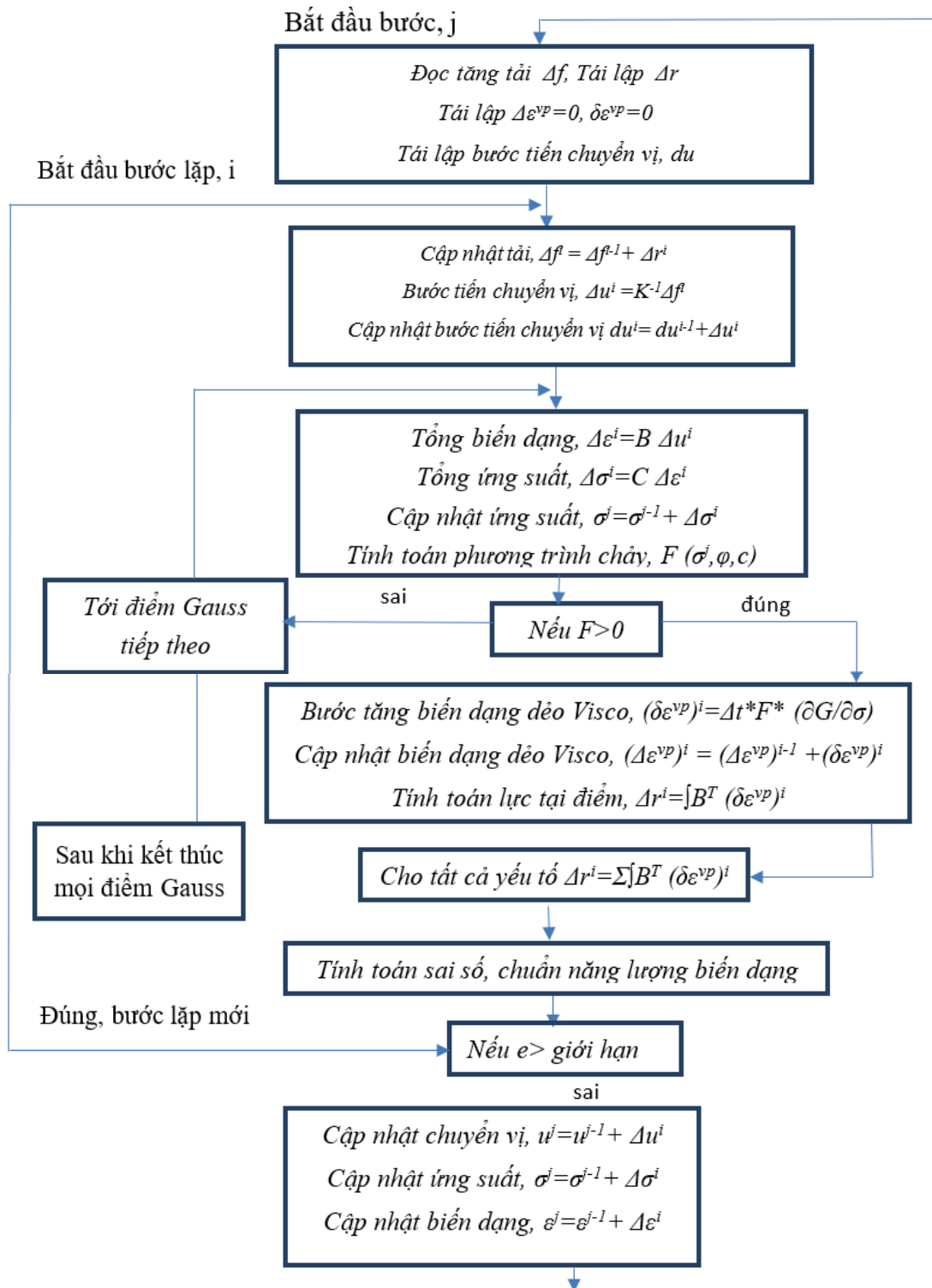
Vết lõm là một phương pháp đơn giản và thường được áp dụng để kiểm tra tính chất cơ của các vật liệu. Gần đây, vết lõm nano (vết lõm có chiều sâu thâm nhập được đo ở mức độ nano) đã được thiết lập như một công cụ cơ bản cho việc nghiên cứu, kiểm tra tính chất cơ học của vật liệu thể tích nhỏ. Kỹ thuật vết lõm nano có thể được dùng không chỉ để tính toán độ cứng, mô đun đàn hồi mà còn tính các chỉ số biến dạng – sự hóa cứng, độ bền chống nứt (cho vật liệu giòn) và các tính chất đàn hồi. Trong nghiên cứu này, trường chuyển vị, biến dạng, ứng suất phân bố trong màng sẽ được phân tích.

Nghiên cứu này xây dựng mô hình toán màng mỏng chịu tải bởi nanoindenter (hình 5.1). Màng mỏng phủ lên đế Si [100] có bán kính 100 mm, dày 450 μm , chiều dày của màng là 1,0 μm . Giả thiết liên kết giữa màng và đế là lý tưởng, quá trình chịu tải của màng không bị ảnh hưởng bởi ma sát, nhiệt độ. Nanoindenter là mũi kim cương Berkovich có mô đun đàn hồi 1040 GPa, hệ số Poisson 0.07. Tuy nhiên, để thuận lợi trong tính toán, mũi Berkovich được qui đổi về dạng đối xứng trục hình nón tương đương có nửa góc 70.3° .



Hình 5.1. Mô hình màng chịu tải

5.2. Lưu đồ giải thuật

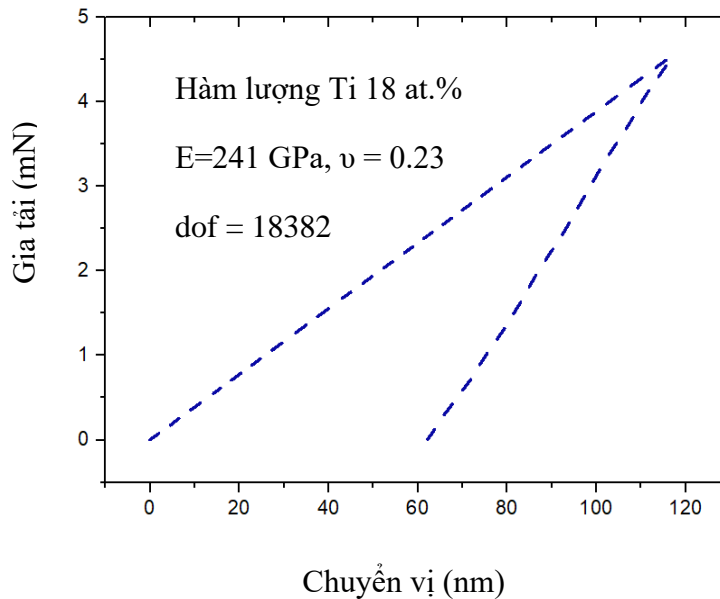


5.3. Độ hội tụ

Trong quá trình tính sử dụng các phương trình được lặp đi lặp lại cho tới khi ứng suất gần bằng với giới hạn chảy bề mặt trong khoảng sai số cho phép nhỏ hơn 0,01 thì đạt được độ hội tụ. Nếu sử dụng điều kiện chuyển vị để tính toán sai số thì giá trị chuyển vị của bước tiến thứ (i) và bước tiến thứ (i + 1) phải nhỏ hơn sai số cho phép.

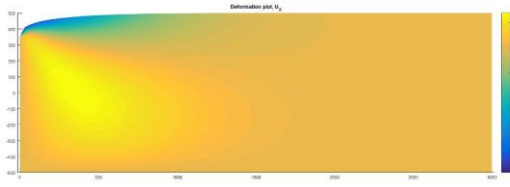
5.4. Kết quả tính toán với Matlab

Trên cơ sở mô hình toán và lưu đồ giải thuật đã xây dựng, chương trình tính được lập trình với ngôn ngữ code Matlab để tính toán chuyển vị, biến dạng và ứng suất bên khi màng chịu tải bởi đầu đâm nanoindenter. Hình 5.2 thể hiện mối quan hệ giữa gia tải và giảm tải với chuyển vị khi màng chịu tải bởi nanoindenter. Màng mỏng nanocomposite chuyển vị dưới tác dụng của tải. Khi gia tải gần đến 4,5 mN, nanoindenter sẽ đâm sâu vào màng khoảng 117,5 nm, sau đó giảm tải và rút nanoindenter khỏi bề mặt màng thì đường cong giảm tải đàn hồi dần đến 62,3 nm, mức độ biến dạng và đàn hồi phụ thuộc vào cơ tính của màng.

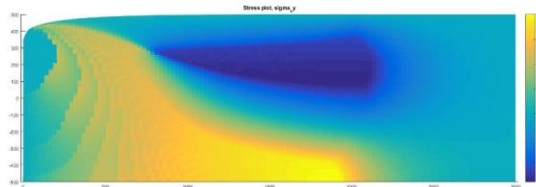


Hình 5.2. Mối quan hệ giữa gia tải và giảm tải của màng

Hình 5.3 đến 5.4 thể hiện trường biến dạng và trường ứng suất bên trong màng. Khi gia tải bằng nanoindenter lên bề mặt sẽ làm màng bị biến dạng. Sự biến dạng lan truyền vào bên trong màng và phát sinh ứng suất. Phương pháp tuyến với bề mặt indenter có giá trị ứng suất lớn dần, truyền xuyên qua màng tới bề mặt phân cách giữa màng và đế.



Hình 5.3. Trường biến dạng của màng nanocomposite

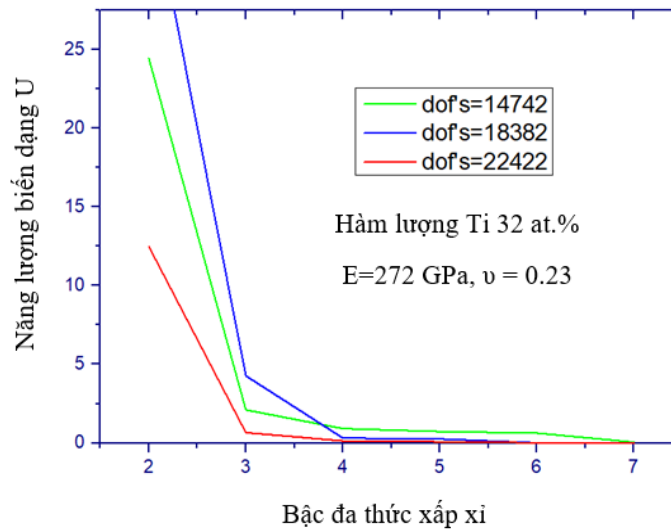


Hình 5.4. Trường ứng suất của màng nanocomposite

Quan sát biểu thị màu cho thấy, ứng suất nén (ứng suất âm) xảy ra tại vùng màu vàng, ứng suất kéo (ứng suất dương) xảy ra tại vùng màu xanh đậm lân cận mặt trên của màng. Khi tải tác dụng đến một giá trị nào đó, màng sẽ hình thành vết nứt, phát triển vết nứt để giải tỏa ứng suất tại đường giao thoa giữa vùng chịu ứng suất nén và vùng chịu ứng suất kéo, vết nứt cũng sẽ hình thành tại bề mặt phân cách giữa màng và đế, nơi chịu ứng suất nén lớn nhất.

5.5. Phân tích và đánh giá sai số theo chuẩn năng lượng khi màng mỏng nanocomposite chịu tải bởi nanoindenter

Nhằm đánh giá độ chính xác lời giải của mô hình toán và lưu đồ giải thuật đã xây dựng, các phương pháp làm mịn lưới kiểu h-refinement, tăng bậc đa thức xấp xỉ p-refinement, và tổ hợp h-p refinement được sử dụng. Từ hình 5.5 có thể thấy rằng, khi thực hiện tính toán lưới càng mịn và bậc đa thức xấp xỉ lớn thì chuẩn năng lượng biến dạng giảm nhanh về gần 0, khi tính toán đến bậc đa thức 4 tốc độ hội tụ giảm. Điều này chứng tỏ rằng lưới càng mịn và tăng bậc đa thức thì sự mất mát năng lượng trong mỗi phần tử càng nhỏ, khi năng lượng trong mỗi phần tử đạt trạng thái cân bằng thì lời giải bằng phương pháp PTHH sẽ gần với giải tích.



Hình 5.5. Chuẩn năng lượng biến dạng theo tổ hợp độ mịn h-p

5.6. Phân tích và đánh giá sai số theo chuẩn năng lượng các màng nanocomposite với cơ tính khác nhau chịu tải bởi nanoindenter

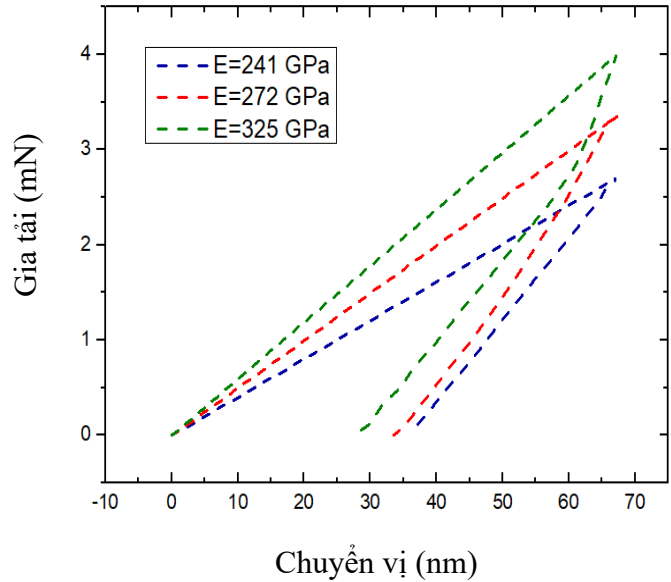
Áp dụng tính toán tính chất cơ học màng nanocomposite TiC/a-C:H khi hàm lượng Ti khác nhau bảng 5.1.

Bảng 5.1. Độ cứng và mô đun đàn hồi của các màng nanocomposite

Các loại màng	Độ cứng	Mô đun đàn hồi E
nc-TiC/a-C:H 1 (18 at.%Ti)	22 GPa	241 GPa
nc-TiC/a-C:H 2 (32 at.%Ti)	28 GPa	272 GPa
Màng TiC (48 at.%Ti)	35 GPa	325 GPa

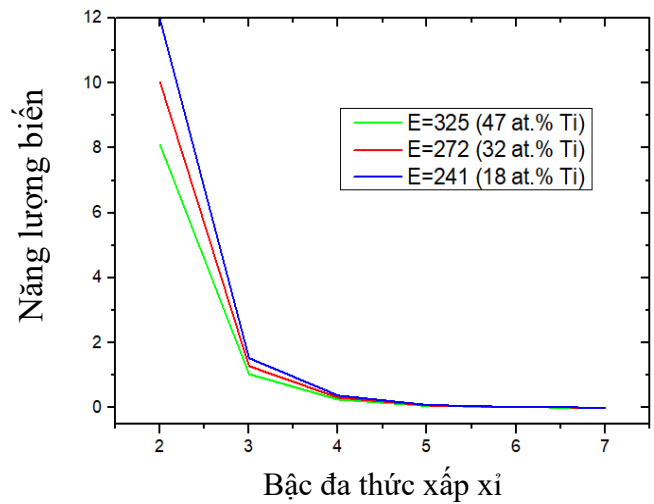
Ở cùng một lượng chuyển vị 67 nm nhưng màng có cơ tính khác nhau thì giá trị gia tải sẽ khác nhau được thể hiện như hình 5.6. Có thể thấy rằng, màng TiC có mô đun đàn hồi lớn nhất (325 GPa) phải gia tải đến 4 mN, màng nc-TiC/a-C:H 2 (32 at.%Ti) có mô đun đàn hồi nhỏ hơn (272 GPa) và giá trị gia tải là 3,4 mN, còn màng nc-TiC/a-C:H 1 (18 at.%Ti) có mô đun đàn hồi nhỏ nhất (242 GPa) chỉ cần gia tải 2,8 mN.

Như vậy, màng có độ cứng và mô đun đàn hồi cao thì khả năng biến dạng kém hơn so với màng có độ cứng và mô đun đàn hồi thấp.



Hình 5.6. Mối quan hệ giữa chuyển vị và tải của các

Phân tích, đánh giá sai số, tốc độ hội tụ theo chuẩn năng lượng của mô hình tương thích dựa trên trường chuyển vị như hình 5.7. Có thể thấy rằng khi tính toán với code Matlab có số bậc tự do là 19602 và thay đổi bậc đa thức xấp xỉ, màng có độ cứng càng cao, nội năng càng lớn thì khả năng biến dạng càng bé.



Hình 5.7. Chuẩn năng lượng biến dạng và bậc đa thức xấp xỉ của các màng nanocomposite (dof =19602)

5.7. Kết luận

- Mô hình màng chịu tải bởi nanoindenter và lưu đồ giải thuật đã được xây dựng. Các màng nanocomposite có nền DLC (TiC/a-C:H) và màng TiC được chế tạo ở phần thực nghiệm là đối tượng tính toán. Bài toán được giải bằng PTHH với ngôn ngữ lập trình là code Matlab. Các phương trình hàm dạng 2D như Q4, Q8, Q9, Q12, Q16, được sử dụng. Từ chương trình đã tính toán xác định được trường chuyển vị, biến dạng và ứng suất bên trong màng khi chịu tải.

- Màng TiC có độ cứng cao, ứng suất nội lớn (nội năng lớn) có khả năng chịu tải thấp. Khi tăng tải, ứng suất nén và kéo trong màng tăng đến một giá trị nào đó thì vết nứt sẽ hình thành, đây là cơ chế duy nhất để giải tỏa ứng suất. Vết nứt hình thành tại đường giao thoa giữa vùng chịu ứng suất nén và vùng chịu ứng suất kéo cũng như tại bề mặt phân cách màng và đế là nơi có giá trị ứng suất nén lớn nhất. Nếu tiếp tục gia tải, màng sẽ bị bong tróc dẫn đến phá hủy hoàn toàn.

- Việc phân tích, đánh giá độ chính xác của lời giải thông qua chuẩn sai số theo chuẩn năng lượng đã được thực hiện. Kết quả cho thấy, khi tăng độ mịn lưới kết hợp tăng bậc đa thức xấp xỉ thì năng lượng biến dạng nhỏ dần về giá trị xấp xỉ 0 do sự thất thoát năng lượng càng bé và hệ lực trở về trạng thái gần cân bằng. Điều này chứng tỏ lưới càng mịn và bậc đa thức xấp xỉ càng cao thì nghiệm bài toán càng chính xác.

Chương 6

Kết luận và hướng phát triển tiếp theo của đề tài

6.1. Kết luận

- Việc chế tạo màng mỏng có nền DLC bằng phương pháp kết hợp phún xạ magnetron và hóa học đã được nghiên cứu và thực hiện. Phương pháp kết hợp này cho tốc độ phủ màng cao hơn nhiều (gấp 2 lần) so với phún xạ magnetron thuần túy. Đồng thời, màng được chế tạo có độ cứng và tính chống mòn tốt hơn rất nhiều so với màng phủ bằng phương pháp hóa học.

- Thông qua việc thiết kế thí nghiệm, tác giả đã có được các thông số phù hợp để phủ màng có cấu trúc nanocomposite với các hạt tinh thể nano TiC (kích thước từ 2-4 nm) phân tán trong nền vô định hình DLC. Cấu trúc tế vi của màng dễ dàng thay đổi thông qua việc thay đổi mật độ năng lượng của bia Ti.

- Thành phần, cấu trúc tế vi, cơ tính và tính chất ma sát của màng được khảo sát chi tiết bằng các thiết bị chẩn đoán chuyên biệt dùng cho vật liệu có cấu trúc nano. Các màng nanocomposite có độ cứng cao (20-30 GPa), ứng suất nội thấp (1-2 GPa), bám dính lên bề mặt chi tiết phủ rất tốt và hệ số ma sát trong điều kiện không bôi trơn khi trượt với thép rất nhỏ (0,16-0,19). Các tính thông số này cho thấy màng nanocomposite có nền DLC vượt trội so với các màng chống mòn thông thường đang được sử dụng như carbide hoặc nitride.

- Trên cơ sở lý thuyết về đo độ cứng nano, lý thuyết biến dạng và phương pháp PTHH, mô hình toán và lưu đồ giải thuật của màng mỏng chịu tải bởi nanoindenter đã được thiết lập. Chương trình tính toán được lập trình bằng ngôn ngữ code Matlab. Các màng nanocomposite có nền DLC được chế tạo trong phần thực nghiệm đã được sử dụng làm đối tượng nghiên cứu để khảo sát độ cứng, phân bố ứng suất, biến dạng và hư hỏng khi chịu tải bởi nanoindenter. Độ chính xác của tính toán và mô phỏng được đánh giá dựa vào sai số theo chuẩn năng lượng và tốc độ hội tụ.

6.2. Hướng phát triển tiếp theo của đề tài

Đề tài có thể phát triển cao hơn theo những hướng sau đây:

- Nghiên cứu thực nghiệm màng nanocomposite phủ trên các chi tiết cụ thể (vòng găng động cơ, bánh răng, thiết bị cắt và gia công kim loại, ...), đánh giá tuổi thọ và tính tin cậy của loại màng này cho từng ứng dụng cụ thể.

- Nghiên cứu thực nghiệm tính chất của màng nanocomposite khi được phủ lên các vật liệu không kim loại (nhựa, cao su).

- Phát triển lý thuyết và xây dựng phần mềm lên cấp độ cao hơn để tính toán và mô phỏng màng nanocomposite khi chịu tải phức tạp (quá trình ma sát, ảnh hưởng của nhiệt, ...).

Những công trình đã công bố

<i>TT</i>	<i>Tên tác giả, tên bài viết, tên tạp chí và số của tạp chí, trang đăng bài viết, năm xuất bản</i>	<i>Sản phẩm của đề tài/ dự án (chỉ ghi mã số)</i>	<i>Số hiệu ISSN</i>	<i>Điểm IF</i>
1	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Ảnh hưởng của mật độ và năng lượng ion đến tính chất của màng Ti-DLC phủ bằng phương pháp plasma tăng cường, Tạp chí Giao thông vận tải, số 10, pp 53-54, 2015	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	
2	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Màng mỏng nanocomposite ma sát thấp, Tạp chí Giao thông vận tải, số 12, pp 45-47, 2015	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	
3	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Lê Hiếu Giang, Trịnh Thái Hưng, Mô phỏng quá trình chịu tải của màng nanocomposite TiC/a-C phủ bằng phương pháp phun xạ magnetron, Tạp chí Giao thông vận tải, số 4, pp 78-82, 2019	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	
4	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Lê Hiếu Giang, Trịnh Thái Hưng, Phân tích, đánh giá sai số trên chuẩn năng lượng theo sự phân bố ứng suất cho màng mỏng nano chịu tải bằng phương pháp phần tử hữu hạn, Tạp chí Giao thông vận tải, số 5, pp 119-122, 2019.	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	
5	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Lê Hiếu Giang, Trịnh Thái Hưng, Phân tích và đánh giá sai số theo chuẩn năng lượng với độ mịn lưới p-refinement cho màng mỏng nanocomposite khi chịu tải bởi nanoindenter, Tạp chí Giao thông vận tải, số 10, pp 48-53, 2019.	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	
6	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Lê Hiếu Giang, Màng cacbon giống kim cương phủ bằng phương pháp phun xạ magnetron kết	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	

	hợp hóa học, Tạp chí Giao thông vận tải, số 7, 2020. (đã chấp thuận đăng)			
7	Lê Văn An, Bùi Xuân Lâm, Lê Hiếu Giang, Cấu trúc tế vi của màng phủ bằng phún xạ magnetron các bia graphite và titan trong môi trường khí C ₂ H ₂ , Tạp chí Giao thông vận tải, số 8, 2020. (đã chấp thuận đăng)	Bài báo khoa học (0,75 điểm theo HĐCDGSNN)	2354-0818	