

Modelowanie *ab initio* stopów o wysokiej entropii

Jan S. Wróbel

Wydział Inżynierii Materiałowej, Politechnika Warszawska

Stopy o wysokiej entropii (HEA – z ang. *high-entropy alloys*) są nowym typem materiałów o wyjątkowej mikrostrukturze i właściwościach. Stopy te składają się z 4 lub więcej składników o zbliżonym stężeniu molowym. Wysoka entropia konfiguracyjna związana z obecnością różnych rodzajów pierwiastków hamuje tworzenie się kruchych faz międzymetalicznych i promuje nieuporządkowane wieloskładnikowe roztwory stałe, które posiadają bardzo unikalne właściwości. Wstępne badania eksperymentalne pokazują, że HEA charakteryzują się bardzo dobrą odpornością na promieniowanie radiacyjne, co czyni je atrakcyjnymi kandydatami do zastosowań w elementach konstrukcyjnych przyszłych reaktorów jądrowych lub syntezy termojądrowej.

Ze względu na olbrzymią liczbę kombinacji zarówno doboru pierwiastków jak również ich stężeń, eksperymentalne przebadanie wszystkich kombinacji stopów z technicznego punktu widzenia jest niemożliwe. Dlatego też wskazane jest teoretyczne zrozumienie wpływu pierwiastków oraz ich stężenia w wieloskładnikowym stopie na stabilność fazową oraz podstawowe właściwości tego stopu. Najwłaściwszą metodą teoretyczną do badania nowych materiałów jest metoda *ab initio* a dokładniej metoda oparta na teorii funkcjonatu gęstości (DFT – z ang. *density functional theory*). Jej najważniejszą zaletą jest to, że nie wymaga danych eksperymentalnych – istniejące dane doświadczalne potrzebne są wyłącznie do weryfikacji wybranego modelu. Największym ograniczeniem metod DFT jest to, że są one kosztowne i maksymalna liczba atomów w symulacjach jest mocno ograniczona. Z tego względu DFT używa się zazwyczaj w połączeniu z metodami w wyższych skalach.

Podczas seminarium zostaną przedstawione wybrane metody oparte na DFT. W szczególności skoncentruję się na połączeniu DFT z metodą rozwinięcia klastrowego (ang. *cluster expansion*) i symulacjami Monte Carlo (MC), które mogą być stosowane do badania stabilności fazowej w funkcji temperatury i stężenia poszczególnych pierwiastków jak również do wytwarzania reprezentatywnych struktur stopów do dalszych obliczeń DFT. Na przykładzie niemagnetycznych stopów RPC Cr-Ta-Ti-V-W oraz magnetycznych stopów RSC Fe-Cr-Mn-Ni zaprezentuję w jakim stopniu uporządkowanie bliskiego zasięgu oraz temperatura przejścia porządek-nieporządek zależy od stężeń poszczególnych pierwiastków i w jaki sposób taka wiedza może posłużyć do projektowania nowych stopów o zwiększonej jednorodności atomów. Wyniki symulacji komputerowych są w bardzo dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi dla próbek stopów Cr-Ta-Ti-V-W wytwarzanych przy użyciu topienia łukowego. Analiza wyników doświadczalnych wykazała m.in., że stop Ta-Ti-V-W jest prawie idealnym roztworem stałym, podczas gdy w innych stopach zaobserwowano wyraźne wydzielenia. Badania doświadczalne wykonane we współpracy z NCBJ wykazały również, że stop Ta-Ti-V-W posiada również bardzo dobre właściwości radiacyjne.

W dalszej części seminarium, przedstawię rolę defektów punktowych i zanieczyszczeń w stopach jak również metody teoretyczne umożliwiające ich badanie. Na końcu zaprezentuję metodę tworzenia potencjałów do dynamiki molekularnej przy użyciu kombinacji metod DFT oraz uczenia maszynowego, która jest tematem mojego aktualnego projektu.