

Seminarium Departamentu Fizyki Materiałów

25 stycznia 2019 (piątek), godz. 11:30
PNT-NCBJ, sala 223 (NEUTRON)

Stabilność fazowa i właściwości stopów o wysokiej entropii: modelowanie i eksperyment

Jan Wróbel, Grzegorz Cieślak, Dariusz Oleszak
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, syntezy termojądrowej bądź też na zastosowania w przemyśle kosmicznym.

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 funkcjonału gęstości. Jej najważniejszą zaletą jest to, że nie wymaga danych eksperymentalnych – istniejące dane doświadczalne potrzebne są wyłącznie do weryfikacji wybranego modelu. Obliczenia dla w pełni nieuporządkowanych roztworów stałych mogą być wykonywane przy użyciu tzw. struktur quasi-losowych. W rzeczywistości jednak bardzo niewielka jest ilość stopów wieloskładnikowych będących jedno-fazowymi roztworami stałymi. W większości przypadków mikrostruktura badanych stopów jest niejednorodna z nierównomiernym rozkładem atomów. Dzieje się tak ze względu na preferencyjne oddziaływania pomiędzy atomami różnych pierwiastków: jedne pary atomów będą się przyciągały a inne odpychały. Niejednorodność oraz uporządkowanie chemiczne mogą być badane przy użyciu metody Cluster Expansion, w której oddziaływania pomiędzy poszczególnymi atomami są wyznaczone na podstawie serii obliczeń *ab-initio*, połączonej z symulacjami Monte Carlo. Symulacje te umożliwiają również analizę entropii konfiguracyjnej, będącej kluczową wielkością odpowiedzialną za tworzenie nieuporządkowanych roztworów stałych.

W prezentacji zostaną przedstawione wyniki modelowania dla stopów z układów Cr-Ta-Ti-V-W (struktura przestrzennie centrowana RPC) oraz Cr-Mn-Fe-Ni (struktura ściennie centrowana RSC). Wyniki teoretyczne dla pierwszej grupy stopów zostały zweryfikowane poprzez badania eksperymentalne. Próbkę stopów Cr-Ta-Ti-V-W zostały wytwarzane przy użyciu topienia łukowego a następnie wygrzane przez 96 godzin w temperaturze 1150 °C. Zarówno próbki świeżo po wytworzeniu jak i te wygrzane zostały zbadane za pomocą fluorescencyjnej spektroskopii rentgenowskiej, dyfrakcji rentgenowskiej, mikroskopii optycznej i skaningowej mikroskopii elektronowej w połączeniu z mapowaniem spektrometrii dyspersji energii promieniowania rentgenowskiego. Analiza wyników doświadczalnych wykazała m.in., że stop Ta-Ti-V-W jest prawie idealnym roztworem stałym, podczas gdy w stopie Cr-Ta-V-W zaobserwowano wyraźne wydzielenia o podwyższonej zawartości atomów Cr i V. Wyniki te są w bardzo dobrej zgodności z wynikami uzyskanymi przy użyciu symulacji komputerowych.