

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE PROJEKTU

Intensywny rozwój zielonych technologii skupiający się na redukcji konsumpcji energii we wszystkich sektorach transportu, stanowi bodziec do projektowania lekkich i wytrzymałych materiałów. Dzięki najlepszemu stosunkowi wytrzymałości do gęstości metale heksagonalne takie jak Ti, postrzegane są jako podstawowa grupa pierwiastków wykorzystywanych do produkcji nowych, lekkich materiałów konstrukcyjnych. Jednym z głównych problemów ograniczających szerokie zastosowanie tych metali jest ograniczona plastyczność ich stopów, istotnie zwiększająca koszty produkcji. Fakt ten sprawia, iż rozwój teorii odkształcenia plastycznego i praktycznych metod umożliwiających przewidywanie właściwości mechanicznych tych materiałów cieszy się niesłabnącym zainteresowaniem [1].

Mechanizmami determinującymi właściwości mechaniczne metali w temperaturze pokojowej są poślizg dyslokacyjny i bliźniakowanie. Dotychczasowe prace badawcze ujawniły ponadto, iż dominującym mechanizmem odkształcenia plastycznego heksagonalnego Ti (α -Ti) jest poślizg dyslokacji śrubowych [2]. Właściwości mechaniczne i aktywność defektów liniowych (dyslokacji) zależna jest od cech mikrostrukturalnych (np. wielkość ziarna, tekstura) oraz składu chemicznego stopu. Podczas gdy pierwszy z czynników może być kontrolowany na drodze obróbek cieplnych i plastycznych, dobór składu chemicznego stopu wymaga kompleksowej wiedzy o wpływie poszczególnych jego składników na energię i aktywność defektów liniowych. Z powodu zredukowanej symetrii sieci krystalicznej oraz znacznej liczby możliwych płaszczyzn poślizgu dyslokacji (względem typowych metali konstrukcyjnych), zależności te pozostają nieznanymi. Dodatkową motywacją wyjaśnienia powyższych relacji są unikalne i odkryte w ostatnim czasie właściwości jednofazowych materiałów heksagonalnych, np: wielokrotne (względem czystego Mg) zwiększenie plastyczności stopów Mg+Y [3], czterokrotny (w stosunku do czystego Ti) wzrost wytrzymałości stopów Ti+O [4] oraz niespotykany, jednoczesny wzrost wytrzymałości i plastyczności zaobserwowany w stopach Ti+In [5]. Złożony charakter oddziaływań dyslokacji i składników stopu może być opisany przy użyciu metod modelowania materiałów uwzględniających zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej. Są one niezbędne do właściwego odwzorowywania budowy dyslokacji śrubowych, ich energii oraz identyfikacji wiązań atomowych. Najnowsze prace naukowe wykorzystujące to podejście ujawniły obecność nieznanymi dotychczas procesów, takich jak: rozszczepienie systemów poślizgu dyslokacji [6], polimorfizm defektów liniowych (odmienne geometrie dyslokacji śrubowych o zbliżonej energii) [2] czy przebudowa rdzeni dyslokacji zachodząca w wyniku ich oddziaływania ze składnikami stopu [7]. Mechanizmy te nie były uwzględniane w dotychczasowych teoriach umocnienia materiałów metalicznych, co dodatkowo utrudnia proces projektowania nowych, lekkich stopów.

Niniejszy projekt poświęcony jest badaniu powyższych zjawisk a jego głównym celem jest identyfikacja mechanizmów umocnienia roztworowego stopów α -Ti, opierająca się na systematycznej analizie wpływu składników stopowych na budowę, energię i poślizg dyslokacji śrubowych, kształtujących właściwości mechaniczne omawianej grupy materiałów. Zakres prac obejmuje modelowanie w skali atomowej oddziaływań defektów liniowych i pierwiastków stopowych z wykorzystaniem metod obliczeniowych typu *ab initio*. Przeprowadzone obliczenia pozwolą określić podstawowe procesy fizyczne (związane ze strukturą atomową i elektronową) odpowiedzialne za makroskopowe właściwości mechaniczne badanych materiałów. Część z pośród opracowanych (wyznaczonych obliczeniowo) stopów zostanie wykonana przy użyciu metody arc melting i poddana badaniom mikrostruktury, składu chemicznego i fazowego oraz właściwości mechanicznych (porównanie właściwości materiałów o zbliżonej wielkości ziarna i jednofazowej strukturze). Zestawienie wyników obliczeniowych (przewidywanego umocnienia) i eksperymentalnych (faktycznych właściwości mechanicznych) pozwoli na określenie dominujących mechanizmów umocnienia roztworowego stopów α -Ti.

Proponowane prace projektowe mają podstawowe znaczenia dla zrozumienia unikalnych właściwości stopów α -Ti+O(In) oraz ich zaadoptowania w nowych materiałach. Zdobyta wiedza będzie istotna nie tylko z punktu widzenia fizyki odkształcenia plastycznego, ale także przyczyni się do świadomego projektowania nowych, lekkich stopów o oczekiwanych właściwościach. Należy podkreślić, iż nowoczesne lekkie materiały konstrukcyjne są powszechnie wykorzystywane w wielu aplikacjach, np: przemyśle samochodowym i lotniczym, turbinach wiatrowych, sprzęcie sportowym, medycynie i innych. Rozwój tej grupy materiałów ma bezpośredni wpływ na poprawę standardów życia oraz redukcję emisji zanieczyszczeń.

Literatura:

- [1]. D. Rodney, et al. *Acta Materialia* 124 (2017) 633;
- [2]. E. Clouet, et al. *Nature Materials* 6 July 2015, DOI:10.1038/NMAT4340;
- [3]. S. Sandlobes, et al. *Acta Materialia* 70 (2014) 92;
- [4]. B. Sun, S. Li, H. IMAI, J. Umeda, K. Kondoh, *Materials Science and Engineering A* 563 (2013) 95;
- [5]. Q.Y. Wang, Y.B. Wang, J.P. Lin, Y.F. Zheng, *Materials Science and Engineering C* 33 (2013) 1601;
- [6]. P. Kwaśniak, P. Śpiewak, H. Garbacz, *Physical Review B* 89 (2014) 144105;
- [7]. T. Tsuru, D.C. Chrzan, *Scientific Reports* (2015) 5 : 8793, DOI: 10.1038/srep08793;