

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Stopy o wysokiej entropii (HEA – z ang. *high-entropy alloys*) są nową grupą stopów metali składających się z czterech lub więcej składników o zbliżonym stężeniu, co w znacznym stopniu odróżnia je od istniejących stopów dostępnych w sprzedaży. Główna koncepcja HEA polega na tym, że wysoka entropia konfiguracyjna związana z obecnością różnych pierwiastków w tych stopach hamuje tworzenie faz międzymetalicznych, których występowanie zwiększa kruchość materiałów i promuje tworzenie nieuporządkowanych roztworów stałych o wyjątkowych właściwościach, wielokrotnie wyraźnie odmiennych od właściwości pierwiastków wchodzących w skład tych stopów. Na przykład, HEA posiadają wysoką granicę plastyczności oraz twardość w podwyższonych temperaturach jak również charakteryzują się bardzo dobrą odpornością na promieniowanie radiacyjne. Jednym z głównych problemów technologicznych związanych z HEA są trudności z nadawaniem kształtu w procesach metalurgicznych (np. w procesie odlewania). Na szczęście, ze względu na utrudnione tworzenie kruchych faz międzymetalicznych, HEA są obiecującymi kandydatami do zastosowania w technologii druku 3D – bardzo ważnej nowoczesnej technologii zapewniającej łatwe projektowanie, niski koszt wytworzenia elementów o złożonej geometrii i małe straty materiału. Do tej pory istnieje tylko kilka materiałów odpowiednich do przemysłowych zastosowań druku 3D. Jest to związane z wyjątkowymi warunkami występującymi podczas druku, takimi jak szybkie chłodzenie i duży gradient temperatury, które indukują naprężenia cieplne oraz nierównowagową mikrostrukturę. Szybko schłodzone HEA wykazują zatem potencjał zastąpienia standardowych stopów do druku 3D.

Głównym celem niniejszego projektu jest poszerzenie wiedzy na temat ewolucji mikrostruktury w stopach o wysokiej entropii w warunkach podwyższonej temperatury, co pozwoli na zrozumienie procesów zachodzących podczas druku 3D a także w trakcie wygrzewania badanych stopów. Badania skupione będą na stopach z układu Ta-Ti-V-W, który został wytypowany na podstawie teoretycznych i eksperymentalnych badań dla stopów Cr-Ta-Ti-V-W przeprowadzonych w poprzednim projekcie.

W ramach niniejszego projektu, ewolucja mikrostruktury stopów z układu Ta-Ti-V-W przebadana zostanie za pomocą kombinacji metody *ab initio* bazującej na teorii funkcjonału gęstości (DFT, z ang. *density functional theory*), metod uczenia maszynowego (ML, z ang. *machine learning*) a także symulacji dynamiki molekularnej (MD, z ang. *molecular dynamics*). Tysiące obliczeń DFT zostanie przeprowadzonych w celu zbadania energii migracji wakansów w badanych stopach a także stabilności fazy krystalicznej względem stanu ciekłego. Obliczenia DFT posłużą także jako dane wejściowe do metod ML. Symulacje MD wykorzystujące potencjał uzyskany za pomocą metod ML dla stopów z układu Ta-Ti-V-W, pozwolą na zbadanie ewolucji mikrostruktury w czasie, dyfuzję atomów a także właściwości sprężystych HEA w funkcji temperatury i stężenia pierwiastków. Wyniki symulacji MD przyczynią się do zrozumienia procesów zachodzących podczas druku 3D oraz podczas wygrzewania tych materiałów, co pozwoli na odpowiednie dobranie parametrów procesu drukowania tych stopów.

Badania teoretyczne wsparte będą badaniami eksperymentalnymi. Wytworzone zostaną próbki badanych materiałów za pomocą metody topienia łukowego. W celu zbadania ewolucji mikrostruktury w funkcji czasu i temperatury, próbki poddane zostaną wygrzewaniu w wysokich temperaturach a następnie scharakteryzowane. Próbki o najwyższej stabilności fazowej zostaną poddane atomizacji przy pomocy samodzielnie skonstruowanego ultradźwiękowego atomizera, a uzyskany w ten sposób proszek użyty zostanie do druku 3D wybranych stopów za pomocą metody SLM (z ang. *selective laser melting*). Głównym celem części eksperymentalnej będzie zaprojektowanie stopu o najbardziej obiecującym składzie chemicznym i dobranie optymalnych parametrów do druku 3D tego typu materiałów. Część eksperymentalna posłuży także do weryfikacji wyników teoretycznych. Ewolucja mikrostruktury (w szczególności wydzielenia, zmiany w składzie chemicznym) zaobserwowana w próbkach bezpośrednio po wytwarzaniu a także w próbkach poddanych wygrzewaniu, zostanie wykorzystana do weryfikacji potencjałów uzyskanych za pomocą metod ML dla stopu Ta-Ti-V-W. Ponadto, porównanie próbek wytworzonych za pomocą metod topienia łukowego i druku 3D pozwoli na zrozumienie jaki wpływ na stabilność stopów o wysokiej entropii ma dobór procesu i parametrów wytwarzania. Wytworzone próbki przebadane zostaną scharakteryzowane za pomocą fluorescencji rentgenowskiej (XFR), dyfrakcji rentgenowskiej (XRD), mikroskopu optycznego i skaningowego mikroskopu elektronowego (SEM) w połączeniu z mapowaniem spektrometrii dyspersji energii promieniowania rentgenowskiego (EDS). Zbadane zostaną także wybrane właściwości mechaniczne otrzymanych stopów.