

## Wyjaśnienie właściwości transportowych w stopach o wysokiej entropii z zastosowaniem podejścia zorientowanego obliczeniowo

W ciągu ostatnich 15 lat koncepcja projektowania materiałów wieloskładnikowych bazująca na ich wysokiej entropii stała się jednym z wiodących nurtów w inżynierii materiałowej. Po raz pierwszy została ona zastosowana w odniesieniu do wieloskładnikowych stopów, znanych obecnie jako stopy o wysokiej entropii (ang. *high entropy alloys* - HEAs), które uważane są za jedne z najbardziej obiecujących materiałów metalicznych. Ogólna idea jest następująca: należy wybrać 5 pierwiastków o stosunkowo zbliżonych właściwościach i strukturach, i wymieszać je razem w proporcjach zbliżonych do równomolowych. Entropia konfiguracyjna takich układów osiąga maksimum dla przypadku roztworu stałego, w którym każdy z węzłów sieci obsadzony jest w sposób losowy przez jeden z pierwiastków składowych. Premiuje to powstawanie prostych struktur krystalicznych o wysokiej symetrii. Opisany sposób postępowania zdecydowanie różni się od tego stosowanego w materiałach konwencjonalnych, w których możemy wyróżnić jeden lub dwa główne składniki, podczas gdy pozostałe pierwiastki pełnią rolę pomniejszych dodatków stopowych. W rezultacie, wraz z rozwojem stopów HEAs, otworzył się przed nami szereg nowych możliwości w zakresie projektowania nowych, lepszych materiałów.

Stopom o wysokiej entropii, od samego początku ich rozwoju, przypisywano szereg niezwyklej właściwości, które w 2006 zostały sklasyfikowane jako "cztery efekty główne": efekt wysokiej entropii (stabilizowanie prostych roztworów stałych), silna dystorsja sieci (zniekształcenie sieci na skutek losowego obsadzenia węzłów atomami o różnych rozmiarach), tzw. *cocktail effect* (pojawianie się nowych właściwości, innych niż te występujące w pierwiastkach składowych) oraz zjawisko powolnej dyfuzji (dyfuzja przebiega wolniej niż w czystych metalach i stopach konwencjonalnych). Efekty te były jedną z głównych sił napędowych dla rozwoju stopów HEAs, jednak ich istnienie jest dzisiaj powszechnie kwestionowane. Dane eksperymentalne w niektórych przypadkach wprost zaprzeczają ich założeniom, w pozostałych często są niejednoznaczne. Mimo to udało się już opracować szereg niezwykle obiecujących materiałów należących do rodziny stopów wysokoentropowych.

Po latach rozwoju stopy HEAs w końcu wkroczyły w etap, na którym mogą być rozważane ich praktyczne, przemysłowe zastosowania. Obecnie są one projektowane głównie pod kątem ich zastosowania w roli wysokotemperaturowych materiałów konstrukcyjnych. Jednak jest już oczywiste, że tradycyjna, jednofazowa koncepcja budowy mikrostrukturalnej tych materiałów, zwłaszcza w odniesieniu do stopów o strukturze typu FCC, nie jest w stanie zapewnić im odpowiednich właściwości mechanicznych. W związku z tym coraz więcej badań skupia się nad układami zawierającymi znaczące ilości fazy typu BCC, cechującej się wyższą twardością i wytrzymałością. Prowadzi to jednak do szeregu pytań związanych ze stabilnością i kinetyką takich układów – pytań, na które obecnie nie jesteśmy w stanie odpowiedzieć.

W ramach proponowanego projektu zaprojektowane i wykonane zostaną pierwsze eksperymenty dyfuzyjne w stopach wysokoentropowych o strukturze BCC. Dzięki najnowszym osiągnięciom w dziedzinie ich modelowania, możliwe stało się odkrycie nowych, stabilnych fazowo układów tego typu, które w końcu pozwalają na przeprowadzenie badań dyfuzyjnych w tych materiałach. Planowane jest zaprojektowanie i zsyntezowanie szeregu nowych składów, ze wspomnianych, do tej pory nie badanych eksperymentalnie układów. Otrzymane materiały zostaną następnie wykorzystane do eksperymentów dyfuzyjnych. Uzyskane wyniki zostaną opracowane z wykorzystaniem teoretycznych modeli dyfuzyjnych, połączonych z analizą bazującą na metodach numerycznych oraz zaawansowanym opisem termodynamicznym. Zastosowana metodologia umożliwi, po raz pierwszy dla stopów o tej strukturze, wyznaczenie współczynników dyfuzji oraz ich zależności od temperatury. Wyniki te pozwolą w konsekwencji na lepsze poznanie potencjału tych materiałów w zakresie zastosowań wysokotemperaturowych, ponieważ dyfuzja bezpośrednio wpływa na wysokotemperaturowe właściwości mechaniczne poprzez zjawisko pełzania. Przeprowadzone w ramach projektu badania znacząco powiększą naszą wiedzę o procesach transportowych w wzmiankowanych stopach, pozwolą również na stworzenie bazy danych umożliwiającej projektowanie właściwości dyfuzyjnych stopów o wysokiej entropii.