

Zainteresowanie **stopami o wysokiej entropii** (ang. *high entropy alloys*, **HEAs**) stale rośnie, ze względu na ich obiecujące własności oraz potencjalne zastosowanie jako **nowoczesne materiały inżynierskie** w różnych sektorach przemysłowych. **Unikalne właściwości** tego typu stopów wynikają z nieporządku strukturalnego, powstałego na skutek zastosowania minimum pięciu pierwiastków stopowych o zbliżonym udziale atomowym. Materiały te krystalizują zazwyczaj jako stopy jedno- lub dwufazowe. Stopy te są na ogół wytwarzane przy użyciu konwencjonalnych metod odlewania, takich jak topienie łukowe, topienie indukcyjne lub krystalizacja metodą Bridgmana. **Możliwe jest także wytwarzanie tych stopów o bardziej złożonej geometrii za pomocą technologii przyrostowych**, zwłaszcza przy użyciu wiązki laserowej i elektronowej. Niedawno pojawiły się doniesienia, że stopy HEAs takie jak ZrTiVCrFeNi i CoCrFeMnNi, zostały wyprodukowane przy użyciu wytwarzania przyrostowego w postaci płytek, walców oraz próbek przeznaczonych do badań wytrzymałościowych. **Brakuje jednak w dalszym ciągu wiedzy na temat wytwarzania próbek o skomplikowanych kształtach, jak struktury komórkowe, przy zastosowaniu selektywnego topienia laserowego (SLM) i sferycznego proszku ze stopów o wysokiej entropii.**

W związku z powyższym, projekt zakłada zaprojektowanie nowej klasy stopów stabilizowanych entropią (zwłaszcza stopów jednofazowych o wysokiej entropii oraz stopów wzmacnianych wydzieleniowo) o unikalnej strukturze zapewniającej dużą odporność korozyjną i wytrzymałość mechaniczną. **W tym celu wybrano stopy o wysokiej entropii o składzie chemicznym CoCrFeNiMs, gdzie Ms = Nb, Mo, V, Si, B, C, na podstawie wstępnych eksperymentów i przeglądu literatury.** Uzyskane w ramach realizacji projektu wyniki mogą stanowić dane wejściowe niezbędne do przeprowadzenia **symulacji numerycznych cech o określonej geometrii i zastosowaniu.** Ponadto, **modelowanie struktury i zmian indukowanych temperaturą** powinno poszerzyć obecną wiedzę na temat stabilności faz w stopach HEAs, zwłaszcza z punktu widzenia termodynamiki. Ponadto, przewiduje się przetestowanie i opisanie możliwości drukowania 3D tych stopów, zwłaszcza próbek **o strukturze komórkowej** wraz z parametrami procesu zoptymalizowanymi pod kątem **atomizacji i selektywnego topienia laserowego (SLM).**

Projekt ten ma również na celu **połączenie modelowania na różnych etapach opracowywania rozwiązania materiałowego z wynikami eksperymentalnymi** w celu uzyskania kompleksowych informacji na temat składu chemicznego, struktury, stabilności i właściwości funkcjonalnych proponowanych stopów HEAs. **Jednym z największych efektów proponowanego projektu jest połączenie zarówno modelowania, jak i badań eksperymentalnych na różnych jego etapach.** Takie podejście pozwoli opisać potencjalne zastosowania stopów o wysokiej entropii CoCrFeNiMs, gdzie Ms = Nb, Mo, V, Si, B, C w oparciu o opracowanie nowych metod produkcji (m.in. technologii SLM i wytwarzania próbek o strukturze komórkowej), opis i modelowanie ich struktury oraz właściwości, a przede wszystkim optymalizacja procesów przez modelowanie na etapie przygotowania próbek do druku 3D. Projekt obejmuje **cztery poziomy modelowania:**

- Modelowanie struktury atomowej w skali bliskiego i średniego zasięgu oraz przemian fizycznych zachodzących podczas chłodzenia z zmienną szybkością (z cyfrową reprezentacją mikrostruktury);
- Optymalizacja parametrów procesu selektywnego topienia laserowego przez zastosowanie metodyki *design of experiment* oraz regresji logistycznej;
- Opracowanie modeli numerycznych oraz wydruk próbek o strukturze komórkowej ze stopów o wysokiej entropii wraz z określeniem ich własności mechanicznych;
- Opracowanie wieloskalowych modeli numerycznych do analizy własności mechanicznych z wykorzystaniem cyfrowych reprezentacji mikrostruktury nowych stopów CoCrFeNiMs.

Według naszej wiedzy, **pierwszy raz zostanie zastosowane kompleksowe podejście, które pozwoli, aby przejść od optymalizacji składu chemicznego do produkcji próbek o złożonej geometrii z wykorzystaniem wytwarzania addytywnego.** Zaplanowane eksperymenty pozwolą na zebranie informacji potrzebnych do porównania wpływu wybranych parametrów termodynamicznych na strukturę i właściwości stopów. Badania korozyjne, wraz z analizą produktów korozji, nie tylko stanowią źródło informacji o mechanizmach korozji stopów HEAs, ale także określają czynniki wpływające na odporność korozyjną tej grupy materiałów i pozwolą na modelowanie tych procesów. Badania próbek wytworzonych przy różnych szybkościach chłodzenia pozwolą poszerzyć wiedzę na temat mikrostruktury i jej wpływu na właściwości. Wyniki badań kalorymetrycznych określą stabilność otrzymanych faz i zostaną powiązane z parametrami termodynamicznymi i metodami wytwarzania.

Wyniki projektu będą miały znaczący wpływ na rozwój wiedzy na temat modelowania, technologii oraz przyszłych zastosowań nowych stopów o wysokiej entropii. Szeroki zakres planowanych badań pozwoli na publikację opracowanych **wyników w prestiżowych czasopismach naukowych.** Ponadto, wartością dodaną projektu jest **współpraca międzynarodowa z Wigner Research Center for Physics** w Budapeszcie.