

Rosnące wymagania zaawansowanego przemysłu (m.in. nuklearnego) wymuszają konieczność nieustannej poprawy właściwości mechanicznych stopów inżynierskich. Wyczerpujące się możliwości dalszej poprawy kształtowania tradycyjnych materiałów inżynierskich, takich jak stale czy nadstopy na bazie Ni kierują uwagę materiałoznawców przede wszystkim na opracowanie nowych grup materiałów metalicznych.

Jednymi z bardziej obiecujących, nowych materiałów są stopy o wysokiej entropii (*high entropy alloys* – *HEA*), których architektura jest inna niż w przypadku konwencjonalnych stopów składających się z głównego składnika domieszkowanego niewielką ilością innych pierwiastków w celu kształtowania właściwości materiału. W przypadku HEA kompozycja co najmniej czterech składników jest wymieszana w przybliżeniu w równych ilościach. W takim przypadku sieć krystaliczna metalu cechuje się przypadkowym rozmieszczeniem składników o różnych właściwościach. Nietypowa budowa HEA sprawia, że specyficzne zjawiska materiałowe mogą zachodzić inaczej niż dla standardowych materiałów inżynierskich, co w konsekwencji może przyczyniać się do uzyskania niespotykanych dotąd właściwości. Cechy te sprawiają, że stopy o wysokiej entropii są obecnie badane przez materiałoznawców na całym świecie.

Właściwości HEA zależą od oddziaływań pomiędzy sąsiadującymi atomami. Pomimo pozornie chaotycznego rozmieszczenia pierwiastków, w niektórych stopach np. w stopach z układu CrMnFeNi, spodziewane jest istnienie chemicznego uporządkowania bliskiego zasięgu (*chemical short range ordering*). Uporządkowanie bliskiego zasięgu może być rozumiane jako utworzenie lokalnej, powtarzającej się w objętości materiału konfiguracji atomów (o rozmiarach ok. 1 nm), która zachowuje swoją stabilność i można ją wyodrębnić w sieci krystalicznej złożonej z przypadkowo rozmieszczonych atomów. Obecność tego typu układu ma korzystny wpływ na mechaniczne umocnienie materiału. Innym sposobem poprawy właściwości mechanicznych jest umocnienie atomami międzywęzłowymi czyli takimi, które nie zajmują pozycji w węzłach sieci krystalicznej. Nieregularne rozmieszczenie atomów tego typu powoduje powstanie dodatkowych naprężeń sprężystych. Efekt ten można osiągnąć poprzez dodatek pierwiastków niemetalicznych, np. tlenu czy azotu. Prace w projekcie skupią się na wytworzenie stopu, w którym oba mechanizmy umocnienia będą działały jednocześnie.

Aktualnie nie istnieje żadna eksperymentalna technika pozwalająca na szczegółowe badania oddziaływań międzyatomowych. Zatem zrozumienie podstawowych zależności musi odbywać się za pomocą symulacji komputerowych. Wykorzystanie technik takich jak teoria funkcjonału gęstości (*density functional theory*), rozwinięcia klastrowego czy symulacji Monte Carlo pozwala na przewidywanie oddziaływań międzyatomowych w sieci krystalicznej stopów o wysokiej entropii oraz na określenie spodziewanych właściwości. Z wykorzystaniem takiego podejścia możliwe będzie precyzyjne zaprojektowanie składu chemicznego nowego stopu. Eksperymentalna część projektu skupi się na odlaniu materiałów oraz na opracowaniu nowej obróbki cieplnej pozwalającej na kształtowanie mikrostruktury i właściwości poprzez uporządkowanie bliskiego zasięgu. Ocena właściwości stopu odbędzie się na podstawie testów mechanicznych i kalorymetrii różnicowej. Zaawansowane metody transmisyjnej mikroskopii elektronowej zostaną użyte do badań realnej struktury krystalicznej wytworzonych stopów w celu walidacji wyników symulacji i poznaniu rzeczywistych czynników wpływających na właściwości stopów.

Głównym wynikiem proponowanego projektu będzie opracowanie procedury projektowania nowych stopów o wysokiej entropii z grupy CrMnNiFe obejmującej modelowanie oraz procesy przeróbki cieplno-plastycznej w celu uzyskania pożądaných właściwości mechanicznych. Właściwości mechaniczne tych stopów będą kształtowane z wykorzystaniem chemicznego uporządkowania bliskiego zasięgu oraz umocnienia atomami międzywęzłowymi.