

Streszczenie

Stabilność fazowa i właściwości stopów Fe-Cr-Mn-Ni z modelowania z pierwszych zasad

Temat stopów o wysokiej entropii zyskuje na popularności, ponieważ coraz więcej odkryć wskazuje na pożądane właściwości, jakie te stopy posiadają oraz możliwość ich szerokiego zastosowania, od biomateriałów po inżynierię lotniczą, w zależności od skali od powłok w nanoskali po materiały konstrukcyjne. Stopy o wysokiej entropii wyróżniają się właściwościami mechanicznymi, katalitycznymi, biokompatybilnością, ogniotrwałością, odpornością na promieniowanie i wielu innymi specyficznymi właściwościami. Możliwości ich zastosowania są tak rozległe, jak przestrzeń fazowa, którą należy przeszukać, aby je znaleźć, dlatego w coraz szybszym tempie rośnie liczba odkryć na ich temat. Ogromna przestrzeń jednak dobrze ukrywa klejnoty, dlatego tak ważne jest stworzenie dobrego algorytmu predykcyjnego, który zawęziłby obszar poszukiwań i przyspieszył wyznaczenie stopów o najlepszych, poszukiwanych właściwościach.

Celem niniejszej pracy było teoretyczne zbadanie stabilności fazowej stopów z układu Fe-Cr-Mn-Ni, które są potencjalnymi kandydatami do zastosowania w reaktorach jądrowych oraz syntezy termojądrowej, ze względu na ich dobre właściwości mechaniczne i podwyższoną odporność na promieniowanie. W tym celu opracowano model predykcyjny dla układów Fe-Cr-Mn-Ni o strukturze regularnej ściennie centrowanej (fcc) i przestrzennie centrowanej (bcc), który umożliwił wskazanie stężeń stopów o najlepszych właściwościach do dalszych badań. Właściwości stopów w całym zakresie układu Fe-Cr-Mn-Ni były badane przy użyciu obliczeń teorii funkcjonału gęstości, modelu rozwinięcia klastrów (ang. cluster expansion), symulacji Monte Carlo, metody CALPHAD oraz analizowane przy użyciu znanych i opracowanych w tej pracy narzędzi. Głównym wynikiem pracy jest skonstruowanie diagramu fazowego fcc-bcc dla układu czteroskładnikowego Fe-Cr-Mn-Ni, na podstawie którego zidentyfikowano obszar występowania jednofazowych nieuporządkowanych stopów o wysokiej entropii o strukturze fcc. Wyniki badań teoretycznych prowadzonych wyłącznie na podstawie obliczeń z pierwszych zasad, były zwalidowane przy użyciu badań eksperymentalnych wykonywanych na Wydziale Inżynierii Materiałowej.

Słowa kluczowe: stabilność fazowa, stopy o wysokiej entropii, ab initio, symulacje Monte Carlo

04.12.2023 Warszawa

Mark Fedorov

Mgn in z. Mark Fedorov

Abstract

Phase stability and properties of Fe-Cr-Mn-Ni alloys from first-principles modeling

The topic of high entropy alloys continues to gain momentum, as more findings indicate the important properties they possess in a wide variety of applications from biomaterials to aerospace engineering, at sizes ranging from nanoscale coatings to structural support, excelling in mechanical, catalytic, biocompatible, refractory, radiation-resistant and many other specific properties. The applicability of high entropy alloys is as vast as the phase space that should be searched to find them, and hence the new findings are coming at a still increasing rate. The vast space, however, hides the gems well. Therefore, it is crucial to develop a good prediction algorithm, which would narrow down the search area or speed up the sampling of the search area.

The aim of this work is to theoretically investigate the phase stability of alloys from the Fe-Cr-Mn-Ni system, which are potential candidates for nuclear fission and fusion applications due to their good mechanical and radiation-resistant properties. For this purpose, the prediction model for the Fe-Cr-Mn-Ni alloys with the face-centered cubic (fcc) and body-centered cubic (bcc) structures was developed in order to find potentially important compositions for further investigation. The properties of alloys in the whole range of the Fe-Cr-Mn-Ni system were investigated using Density Functional Theory, Cluster Expansion model, Monte Carlo simulations, and CALPHAD calculations and analyzed using known tools and the ones developed during this work. As the main result, the fcc-bcc phase diagram is constructed for the Fe-Cr-Mn-Ni quaternary system, and the region of disordered single fcc phase alloys is identified. The results of theoretical studies performed only based on first principles were validated by experiments performed at the Faculty of Materials Science and Engineering.

Keywords: phase stability, high entropy alloy, *ab initio*, Monte Carlo simulations

04.12.2023 Warszawa

Mark Fedorov