

“Phase stability and short-range ordering of W-based SMART materials and high-entropy alloys predicted from the first-principles modelling”

mgr inż. Damian Sobieraj

Abstract

A comprehensive study has been carried out on the phase stability and short-range ordering of W-based High-Entropy Alloys (HEAs) in the W-Cr-Ta-Ti-V system, and Self-passivating Metal Alloys with Reduced Thermo-oxidation (SMART) in the W-Cr-Y-Zr system, as potential candidates for application in the future fusion power plants. By applying first-principles thermodynamic study, including Density Functional Theory (DFT), Cluster Expansion (CE) method and Monte Carlo (MC) simulations for temperature-dependent properties, the research offers detailed insights into the formation and stability of various alloy phases.

The study allows to understand how different atomic combinations and their compositions influence the formation of solid solutions and ordered structures in two groups of W-based alloys. Through the detailed analysis of the Short-range Order Parameter (SRO), it is shown that in HEAs from the W-Cr-Ta-Ti-V system, the strongest attraction occurs between Cr and V, as well as Ta and W atoms. The lowest order-disorder transition temperature (ODTT), therefore the widest range of temperatures at which disordered solid solution is present, has been observed for the quaternary W-Ta-Ti-V alloy. Additionally, the model developed in this study has been used to explain the mechanisms behind the formation of experimentally observed Cr and V-rich precipitates in the W38-Ta36-Cr15-V11 alloy with high radiation resistance.

Calculations performed for SMART materials in the W-Cr-Y-Zr system revealed that the addition of Zr in small concentrations stabilizes Y precipitates and helps maintain an optimal order-disorder transition temperature for potential applications.

The following study contributes to the theoretical understanding of complex alloys while also setting a foundation for future experimental validations and the potential for industrial applications of W-based HEAs and SMART materials. Through the theoretical approach, the research highlights the importance of atomic-level interactions determining the material properties and opens new avenues for the design and optimization of advanced metallic alloys.

Keywords: phase stability, high entropy alloy, self-passivating alloys, *ab initio*, Monte Carlo simulations

„Stabilność fazowa i uporządkowanie bliskiego zasięgu w materiałach SMART i stopach o wysokiej entropii zawierających wolfram wyznaczone przy użyciu modelowania z pierwszych zasad”

mgr inż. Damian Sobieraj

Streszczenie

W ramach niniejszej pracy wykonano badania nad stabilnością fazową i uporządkowaniem bliskiego zasięgu stopów o wysokiej entropii (HEAs - z ang. High-Entropy Alloys) z układu W-Cr-Ta-Ti-V, oraz samopasywujących się materiałów (SMART - z ang. Self-passivating Metal Alloys with Reduced Thermo-oxidation) z układu W-Cr-Y-Zr, będących potencjalnymi kandydatami do zastosowań w reaktorach syntezy termojądrowej. W celu zrozumienia mechanizmów termodynamicznych i strukturalnych występujących w badanych stopach wykorzystano modelowanie oparte na Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT – z ang. Density Functional Theory), metodzie Rozwinięcia Klastrowego (CE – z ang. Cluster Expansion) i symulacjach Monte Carlo (MC)

Przeprowadzone symulacje pozwoliły zrozumieć, w jaki sposób różne pierwiastki i ich stężenia wpływają na tworzenie się roztworów stałych i struktur uporządkowanych w dwóch grupach stopów na bazie W. Poprzez szczegółową analizę parametrów uporządkowania bliskiego zasięgu wykazano, iż w stopach o wysokiej entropii z układu W-Cr-Ta-Ti-V najsilniejsze przyciąganie występuje pomiędzy atomami Cr i V, oraz Ta i W. Najniższą temperaturę przemiany porządek-nieporządek, a zatem najszerszy zakres temperatur występowania roztworu stałego, posiadał czteroskładnikowy stop W-Ta-Ti-V. Model stworzony w ramach niniejszej pracy pozwolił także na wyjaśnienie mechanizmów powstawania eksperymentalnie zaobserwowanych wydzielen bogatych w Cr i V w stopie W38-Ta36-Cr15-V11 o wysokiej odporności na promieniowanie.

Obliczenia wykonane dla materiałów SMART wykazały, iż dodanie Zr w małych stężeniach stabilizuje wydzielenia Y w stopach z układu W-Cr-Y-Zr, jednocześnie pozwalając na osiągnięcie optymalnej, z punktu widzenia potencjalnych zastosowań, temperatury przemiany porządek-nieporządek.

Uzyskane wyniki przyczyniają się do lepszego teoretycznego zrozumienia wieloskładnikowych stopów, jednocześnie stanowiąc fundament pod przyszłe walidacje eksperymentalne i potencjalne zastosowania materiałów SMART i HEAs na bazie W. Przeprowadzone symulacje podkreślają znaczenie interakcji na poziomie atomowym w kształtowaniu właściwości materiałów i otwierają nowe drogi do projektowania i optymalizacji zaawansowanych stopów metalicznych

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