

Projekt 6.4 Sprężystość izotropowa i metastabilne stopy tytanu o strukturze regularnej przestrzeni centrowanej – obliczenia z pierwszych zasad i badania eksperymentalne.

Promotor: Dr hab. Paweł Strąk

Instytut: Instytut Wysokich Ciśnień PAN

Pracownia: NL-3

www: www.unipress.waw.pl

Opis

Wszystkie metale o strukturze krystalicznej charakteryzują się anizotropią sztywności występującą na różnych kierunkach krystalograficznych. Fakt ten jest efektem niejednorodnego rozmieszczenia rdzeni jonowych w przestrzeni trójwymiarowej kryształów metalicznych a co za tym idzie niejednorodnej gęstości elektronowej. W przypadku metali przejściowych, których właściwości są determinowane stopniem wypełnienia pasma d, poziom anizotropii sprężystości może być świadomie kontrolowany na drodze mieszania metali o różnej konfiguracji walencyjnej. Wczesne prace eksperymentalne wykazały, iż możliwe jest uzyskanie układu sprężystości izotropowego (jednorodna odpowiedź na zadane obciążenie, niezależnie od kierunku jego przyłożenia), który ma postać roztworu stałego metali przejściowych i średnią liczbę elektronów walencyjnych (e/a) równą 4.7. W przypadku stopów dwuskładnikowych, warunek ten może być spełniony jednak jedynie dla układu Ti-V dzięki nieograniczonej rozpuszczalności V w Ti oraz niskiej liczby elektronów typu d ($e/a = 4$ i 5 dla kolejno Ti oraz V). Układy wieloskładnikowe nie były dotychczas badane w powyższym kontekście, również z powodu braku danych termodynamicznych opisujących ich skład oraz stabilność fazową. W ostatnich latach potwierdzono jednak, istnienie roztworów T-Cr-V oraz Ti-Fe-Cr, które spełniają kryterium elektronowe $e/a = 4.7$. Właściwości mechaniczne tych układów jak i budowa i właściwości defektów strukturalnych (np. defektów liniowych – dyslokacji) kontrolujących inne, kluczowe właściwości materiałów metalicznych jak np. plastyczność, nie zostały jednak dotychczas wyznaczone co jest celem proponowanej pracy.

Cel projektu:

Celem pracy jest określenie właściwości mechanicznych, w tym monokrystalicznych stałych sprężystości oraz struktury i właściwości (energii, mobilności) wybranych defektów sieci krystalicznej nowej grupy izotropowo sprężystych stopów tytanu o strukturze regularnej przestrzennie centrowanej.

Wymagania:

- doświadczenie w symulacjach DFT, doświadczenie w analizie danych
- licencjat lub magister lub odpowiednie doświadczenie zawodowe
- biegłość w języku angielskim
- silne umiejętności analityczne, techniczne, rozwiązywania problemów