

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE PROJEKTU

Rosnąca emisja gazów cieplarnianych prowadząca do obserwowanych zmian klimatu jest obecnie w centrum zainteresowania środowiska naukowego i przemysłu, prowadząc do dynamicznego rozwoju zielonych technologii ukierunkowanych na szeroko rozumianą redukcję zużycia energii. Podejście to jest obecne także w przemyśle transportowym poszukującym nowych rozwiązań w zakresie efektywnych systemów napędowych i lekkich konstrukcji. Aktualne analizy wskazują, iż zmniejszenie masy pojazdów samochodowych o 10% skutkuje redukcją zużycia paliwa w zakresie 6-8% [1]. Ta sama oszczędność masy w przypadku aut hybrydowych i elektrycznych zmniejsza spalanie benzyny o 5.1% i/lub wydłuża ich zasięg o 13.7% [1]. Wymienione oszczędności przekładają się na redukcje emisji CO₂ o kilkadziesiąt milionów ton rocznie [2], obrazując niebagatelną potrzebę rozwijania nowych, lekkich materiałów konstrukcyjnych mających szerokie zastosowanie także w innych sektorach przemysłu.

Pośród wszystkich metali lekkich, tytan jako jedyny należy do grupy metali przejściowych (MP), które z powodu posiadania elektronów walencyjne typu *d*, posiadają wiązania atomowe o charakterze mieszanym, metalicznym i kowalencyjnym. Liczba tych elektronów wpływa bezpośrednio na strukturę i właściwości MP, będąc jednocześnie przydatnym parametrem podczas projektowania nowych materiałów. Średnia liczba elektronów walencyjnych w stopach MP odpowiada także za anizotropię ich właściwości sprężystych, która jest typowa dla wszystkich układów krystalicznych z powodu nie identycznej gęstości atomów na różnych kierunkach krystalograficznych. Dostępne badania eksperymentalne wskazują jednak, iż możliwe jest uzyskanie izotropowych sprężystych stopów MP, co wymaga specyficznej wartości średniej liczby elektronów walencyjnych. Wymogi te mogą być spełnione w stopach Ti-V [3] oraz zgodnie z najnowszymi danymi termodynamicznymi w przystępnych cenowo układach trójskładnikowych, np. Ti-Fe-Cr [4]. Materiały takie powinny charakteryzować się doskonałymi właściwościami mechanicznymi z powodu idealnie jednorodnej odpowiedzi na przyłożone naprężenia sprężyste (brak lokalnych koncentracji naprężeń wewnętrznych wynikających z niekompatybilności sprężystej elementów mikrostruktury). Z drugiej jednak strony, wpływ anizotropii sprężystości na plastyczność jest słabo zrozumiany, gdyż MP wykazują także anizotropię plastyczności wynikającą z polimorfizmu rdzeni dyslokacji (defekty liniowe, których ruch odpowiada za realizację odkształcenia plastycznego). Anizotropia sprężystości i plastyczności jest kluczowa dla wszystkich metali konstrukcyjnych gdyż odpowiada za ich podstawowe właściwości, odporność zmęczeniową i ciągliwość. Cechy te są szczególnie ważne w przypadku metali lekkich, np. tytanu charakteryzującego się ograniczoną zdolnością do plastycznego formowania.

Celem niniejszego projektu jest wyznaczenie wpływu unikalnej izotropii sprężystości występującej w nowie grupie stopów tytanu na właściwości mechaniczne związane z odkształceniem sprężystym (np. odporność zmęczeniowa) jak i plastycznym (granica plastyczności, wytrzymałość na rozciąganie, umocnienie odkształceniowe, wydłużenie do zerwania). Spodziewane, atrakcyjne właściwości tych materiałów są pożądane szczególnie w aplikacjach gdzie wysoki stosunek wytrzymałości do gęstości ma kluczowe znaczenie. Niewielka wiedza na temat badanych stopów generuje jednak wiele pytań związanych z podstawowymi mechanizmami zachodzącymi w skali atomowej, które wymagają wyjaśnienia. Zagadnienia te są obecnie intensywnie badane przy użyciu metod modelowania z zakresu mechaniki kwantowej [5–12]. Podejście to będzie wykorzystane także w niniejszym projekcie, tzn. wyznaczenie składu chemicznego nowych izotropowych sprężystych stopów Ti na drodze obliczeń *ab initio*, badania zjawiska izotropowości sprężystości/plastyczności oraz prace eksperymentalne ukierunkowane na analizę struktury i właściwości mechanicznych opracowanych materiałów. Zgromadzona wiedza będzie wysoce przydatna dla dalszego rozwoju i świadomego projektowania stopów Ti o przystępnej cenie i korzystnych właściwościach.

Bibliografia

- [1] W. J. Joost, JOM 64 (9) (2012) 1032–1038.
- [2] C. Thiel, W. Nijs, S. Simoes, J. Schmidt, A. van Zyl, E. Schmid, Energy Policy 96 (2016) 153 – 166.
- [3] E. Collings, H. Giegel, Plenum Press, New York, 1975.
- [4] S. Wang, K. Wang, G. Chen, Z. Li, Z. Qin, X. Lu, C. Li, Calphad 56 (2017) 160–168.
- [5] E. Clouet, D. Caillard, N. Chaari, F. Onimus, D. Rodney, Nature Materials 14 (2015) 931–936.
- [6] L. Dezerald, D. Rodney, E. Clouet, L. Ventelon, F. Willaime, Nature Communications 7 (1) (2016) 11695.
- [7] P. Kwasniak, H. Garbacz, K. Kurzydłowski, Acta Materialia 102 (2016) 304–314.
- [8] D. Rodney, L. Ventelon, E. Clouet, L. Pizzagalli, F. Willaime, Acta Materialia 124 (2017) 633–659.
- [9] P. Kwasniak, H. Garbacz, Acta Materialia 141 (2017) 405–418.
- [10] P. Kwasniak, E. Clouet, Acta Materialia 180 (2019) 42–50.
- [11] P. Kwasniak, J. S. Wróbel, H. Garbacz, Journal of Mechanical Behavior of Biomedical Materials 88 (2018) 352–361.
- [12] A. Kraych, E. Clouet, L. Dezerald, L. Ventelon, F. Willaime, D. Rodney, npj Comput. Mater. 5 (109) (2019) 1–8.