

Badanie własności magnetycznych i strukturalnych wybranych faz Franka-Kaspera w układach trójskładnikowych zawierających żelazo

Opiekun naukowy: dr hab. Inż. Jakub Cieślak

Badania wieloskładnikowych faz Franka-Kaspera (FK) koncentrują się obecnie na układach modelowych (np. σ -FeCrNi) lub na określonych gatunkach stali. Dla wielu układów opisane zostały warunki powstawania tej fazy (zakresy temperatur i stężeń), czynniki i procesy które mogą przyspieszać lub opóźniać jej powstawanie, wpływ jej obecności na własności mechaniczne stopów czy też kinetyki transformacji. Wszystkie wymienione kierunki badań skupiają się jednak głównie na znalezieniu odpowiedzi na pytanie, jak uniknąć powstawania tej fazy lub opóźnić ten proces. Tymczasem własności poszczególnych faz w układach trójskładnikowych nie były dotąd szczegółowo badane. Spowodowane jest to przede wszystkim brakiem uporządkowania na licznych możliwych podsieciach co znacznie utrudnia interpretację wyników pomiarowych.

Celem pracy jest analiza własności fizycznych faz FK w wybranych układach trójskładnikowych, zawierających żelazo. Praca ma charakter teoretyczno-eksperymentalny. W szczególności planuje się wykonanie obliczeń struktury elektronowej dla fazy χ -FeCrMo. Wyniki uzyskane na tej podstawie zostaną porównane z analogicznymi otrzymanymi równolegle, na drodze eksperymentalnej. Proponowane podejście pozwala na weryfikację jakości zastosowanych modeli i poprawności przyjętych założeń, a zastosowanie różnych technik pomiarowych i obliczeniowych a następnie zapewnienie spójności wniosków wynikających z obliczeń i eksperymentu w efekcie uczyni rezultaty końcowe bardziej wiarygodnymi.

W szczególności przeprowadzone zostaną badania dyfrakcyjne (rentgenowskie i neutronowe) umożliwiające określenie stałych sieci czy obsadzenia poszczególnych podsieci w pierwiastki stopowe. Zastosowanie do badań spektroskopii mossbauerowskiej przyniesie informacje o oddziaływaniach nadsubtelnych atomów w tej fazie. Badania magnetyzacji w funkcji temperatury lub zewnętrznego pola magnetycznego pozwolą na analizę struktury magnetycznej oraz na wyznaczenie temperatury uporządkowania magnetycznego. Wspomniane obliczenia struktury elektronowej przeprowadzone zostaną w oparciu o teorię funkcjonału gęstości przy wykorzystaniu metod teorii wielokrotnego rozpraszania i funkcji Greena (metoda Korringi-Kohna-Rostokera). Analizie zostaną poddane gęstości ładunkowe i spinowe, momenty magnetyczne oraz gradienty pól elektrycznych a także energie formowania. Na tej podstawie zostaną wyznaczone funkcje opisujące zależność energii formowania i entropii od obsadzenia podsieci poszczególnymi pierwiastkami co pozwoli na wyliczenie obsadzeń podsieci w zależności od temperatury, poprzez minimalizację entalpii swobodnej.