


Streszczenie

Celem niniejszej pracy był opis mechanizmów umocnienia roztworowego heksagonalnych stopów Ti (α -Ti) przy użyciu metod obliczeniowych *ab initio*. Przyjęto tezę, iż analiza struktury elektronowej i identyfikacja podstawowych zjawisk zachodzących w skali atomowej podczas odkształcenia plastycznego umożliwi zdefiniowanie mechanizmów odpowiedzialnych za umocnienie roztworowe stopów α -Ti.

W ramach rozprawy doktorskiej wykonano systematyczne badania właściwości mechanicznych wybranych, dwu- i trzy składnikowych heksagonalnych stopów Ti przy użyciu teorii funkcjonału gęstości. Przeprowadzone prace teoretyczne składają się z dwóch części: (i) obliczenia właściwości sprężystych i przewidywanie plastyczności analizowanych układów drogą pośrednią z wykorzystaniem kryteriów plastyczności bazujących na stałych sprężystości oraz (ii) bezpośrednią ocenę plastyczności opierającą się na obliczeniach uogólnionej energii błędu ułożenia (UEBU). Do głównych osiągnięć pracy należy zaliczyć zaproponowanie autorskiej procedury obliczeń UEBU z wykorzystaniem metody Nudged Elastic Band (NEB), pozwalającej po raz pierwszy uwzględnić rzeczywiste efekty sprężyste towarzyszące procesowi nukleacji dyslokacji oraz umożliwiającą wyznaczanie rzeczywistych trajektorii poślizgu dyslokacji w dowolnych materiałach krystalicznych. Zastosowanie powyższej metodyki obliczeń pozwoliło na identyfikację aktywnych systemów poślizgu dyslokacji oraz określenie nieznanych dotychczas mechanizmów umocnienia roztworowego Ti. Efektem przeprowadzonych badań jest również odkrycie nowych zjawisk z zakresu fizyki odkształcenia plastycznego w tym, zjawiska rozszczepienia systemów poślizgu kryształów heksagonalnych oraz migracji międzywęzłowych składników stopowych indukowanej naprężeniem i przebudową sieci krystalicznej zachodzącej podczas poślizgu dyslokacji. Otrzymane wyniki porównano z dostępnymi danymi eksperymentalnymi oraz oceniono ich przydatność podczas projektowania nowych, lekkich materiałów konstrukcyjnych.


.....
prof. nzw. dr hab. inż. Halina Garbacz


.....
mgr inż. Piotr Kwasniak