

## STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

### **Tytuł projektu:**

*Wpływ dyfuzji na powstawanie fazy omega w metastabilnych stopach tytanu beta: mikromechaniczne modelowanie z wykorzystaniem metody pola fazowego*

Nowoczesne samoloty to jedne z najbardziej zaawansowanych technologicznie maszyn. Ich wydajność i niezawodność opiera się na dziesiątkach lat multidyscyplinarnych badań naukowych. To samo dotyczy chirurgicznego zespalania złamań, czy wymiany stawu biodrowego lub kolanowego, które należą do największych osiągnięć medycyny. W mozaice wymaganej wiedzy w tych dwóch zupełnie odległych dziedzinach istnieje jeden wspólny element – dogłębna wiedza z zakresu materiałoznawstwa, a w szczególności opracowanie i rozwój stopów na bazie tytanu. Stopy tytanu to materiały metaliczne o unikalnej kombinacji właściwości: wysokiej wytrzymałości, zmniejszonej gęstości i doskonałej odporności na korozję. Zaawansowane stopy tytanu wykorzystywane są w przemyśle lotniczym i medycznym, inne w architekturze, sporcie, a nawet w jubilerstwie. Właściwości tych materiałów, a tym samym możliwość ich zastosowania, w dużym stopniu zależą od sposobu ich przetwarzania. W rozwoju materiałów metalicznych odeszliśmy (po tysiącach lat) od eksperymentowania metodą prób i błędów na rzecz projektowania opartego na wiedzy i oczywiście na modelowaniu komputerowym.

Niniejszy projekt koncentruje się na modelowaniu powstawania i ewolucji osobliwych nanocząstek w stopach tytanu, znanych jako cząstki fazy omega. Ilościowe przewidywanie powstawania i ewolucji tych cząstek ma kluczowe znaczenie dla wzajemnego powiązania charakterystyk procesów wytwarzania tych materiałów z ich wydajnością. W tym celu zostaną opracowane zaawansowane i unikalne modele matematyczne, które następnie zostaną skalibrowane i poddane walidacji. Modele te będą bazowały na metodzie pola fazowego, która jest efektywnym narzędziem do modelowania przemian fazowych, takich jak ta związana z powstawaniem fazy omega. Istotą tej metody jest traktowanie powierzchni międzyfazowych jako rozmytych, to znaczy posiadających pewną grubość, dzięki czemu ich propagacja i ewolucja mikrostruktury może być symulowana na stałej siatce obliczeniowej. Docelowo, wyniki opartych na modelowaniu analiz pogłębią zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za powstawanie fazy omega.

W projekcie wezmą udział dwa zespoły badawcze o komplementarnych kompetencjach i wyposażeniu. Zespół z Warszawy, kierowany przez prof. Stanisława Stupkiewicza, będzie odpowiedzialny głównie za opracowanie modeli w ramach metody pola fazowego, bazując na wieloletnich doświadczeniach z tym podejściem i z mechaniką materiałów w ogóle. Zespół z Pragi, kierowany przez dr. Karela Tůmę, skupi się zarówno na komputerowej implementacji tych modeli, w tym na obliczeniach dużej skali, jak i na części eksperymentalnej projektu, niezbędnej do kalibracji i walidacji modelu. W części eksperymentalnej zostaną wykorzystane najnowocześniejsze urządzenia do charakteryzacji, takie jak mikroskopy elektronowe i dyfraktometry rentgenowskie.