

Temat pracy doktorskiej/Subject:

Własności fizyczne wybranych faz Franka-Kaspera/Physical properties of selected Frank-Kasper phases

Opiekun naukowy/Supervisor: prof. dr hab. Stanisław M. Dubiel

Opiekun pomocniczy/Co-supervisor: dr inż. Jakub Cieślak

Informacja o fazach FK/Short description of FK phases

Fazy FK, inaczej fazy topologicznie ciasno-upakowane, mają złożoną strukturę krystalograficzną, którą można opisać przy pomocy wielościanów charakteryzujących się dużymi wartościami (12-16) liczby koordynacyjnej. Do najbardziej znanych faz FK należą: A15, fazy Lavesa, M, P, R, γ , δ , μ oraz σ . Spośród wymienionych faz, najczęściej badanymi są fazy Lavesa oraz σ . Zainteresowanie fazami FK ma dwa aspekty: technologiczno-przemysłowy oraz naukowy. Pierwszy z wymienionych aspektów wynika z faktu, że fazy FK mogą występować w takich materiałach strukturalnych jak: stale nierdzewne, superstopy na bazie Co i Ni. Ich obecność drastycznie pogarsza własności użyteczne tych materiałów, czyli jest zjawiskiem wysoce niekorzystnym. Natomiast zainteresowanie naukowe fazami FK wynika nie tylko z ich skomplikowanej struktury krystalograficznej, ale także z ich ciekawych własności fizycznych m. in. magnetycznych czy dynamicznych, które nie zostały dotychczas zbadane systematycznie. Skomplikowana struktura krystalograficzna oraz brak stechiometrii sprawiają, że interpretacja wyników badań eksperymentalnych jest niejednoznaczna i trudna a obliczenia teoretyczne żmudne. Połączenie obu typów badań tj. eksperymentalnych z teoretycznymi jest strategią, która daje pozytywne wyniki. Lepsze poznanie własności fizycznych FK może mieć korzystny wpływ na technologię materiałów, w których fazy FK mogą występować.

Frank-Kasper (FK), or topologically close-packed phases, have a complex crystallographic structure which can be represented in terms of polyhedra with 12, 13, 14, 15 and 16 coordination numbers. The most common members of a FK-phases family are: A15, Laves phases, M, P, R, γ , δ , μ and σ . Among them the Laves phases and σ seem to be the most frequently investigated ones. The interest in FK-phases is twofold: technologically-industrial and scientific. The former stems from the fact that their presence in technologically important materials like stainless steels, Co- and Ni-based super alloys, is detrimental to their useful properties because FK-phases precipitate non-coherently, are brittle, and often deplete the matrix of solid-solution elements, thus changing the original material properties. In other words, FK-phases are technologically an unwanted phenomenon. On the other hand, scientifically, they are very interesting *per se* as complex objects. Furthermore, they are quite challenging, first because most of them have not yet been investigated thoroughly enough and their physical properties are not known in detail, and second because their complex and often non-stoichiometric structure makes them a very demanding target for theoretical calculations. The latter feature also causes the interpretation of measurements carried out on FK-phases to be difficult and not unique task. In such circumstances, a combination of both experimental and theoretical studies can be the proper approach to successfully investigate physical properties of FK-phases. Knowledge of the latter may have a positive impact on the technology of materials in which FK-phases may precipitate.

Zakres i cel pracy/Aim:

Celem pracy jest synteza wybranych faz FK w stopach na bazie Fe oraz zbadanie ich własności fizycznych. Badania doświadczalne będą obejmować: (a) identyfikację fazy oraz określenie parametrów komórki elementarnej (dyfrakcja neutronów lub promieni rentgenowskich), (b) określenie obsadzenia poszczególnych węzłów sieciowych przez atomy stanowiące dany stop, (c) pomiary własności fizycznych metodami: spektroskopii mössbauerowskiej, magnetometrii, promieniowania synchrotronowego, (d) obliczenia struktury elektronowej i magnetycznej metodą KKR (CPA).

The aim of the project is a synthesis of some FK phases, determination of structural parameters and study of their physical properties using both experimental and theoretical tools. The former includes: X-ray and neutron diffraction techniques, Mössbauer spectroscopy, magnetometry and synchrotron radiation. The latter will be based on the charge and spin self-consistent KKR (CPA) -method.

Przykładowe nasze publikacje/Examples of our recent papers on the issue:

S. M. Dubiel, J. Cieślak, σ -Sigma-phase in Fe-Cr and Fe-V alloy systems and its physical properties, Crit. Rev. Sol. Stat. Mater. Sci., 36 (2011) 191-208

R. Barco, P. Pureur, G.L.F. Fraga, S.M. Dubiel, σ Extended scaling in the magnetic critical phenomenology of the σ -phase Fe_{0.53}Cr_{0.47} and Fe_{0.52}V_{0.48} alloys, J. Phys. Condens. Matter, 24 (2012) 046002

J. Cieślak, S.M. Dubiel, M. Reissner, σ Site occupancy and lattice parameters in sigma-phase Co-Cr alloys, Acta Crystal. B, 68 (2012) 123-127

J. Cieślak, S.M. Dubiel, J. Przewoźnik, J. Tobała, σ Structural and hyperfine characterization of σ -phase Fe-Mo alloys, Intermetallics, 31 (2012) 132-136

J. Cieślak, J. Tobała, S.M. Dubiel, σ Theoretical study of magnetic properties and hyperfine interactions in σ -FeV alloys, Intermetallics, 22 (2012) 7-12

J. Cieślak, S.M. Dubiel, σ The Debye temperature of σ -phase Fe-Mo compounds as determined with Mössbauer spectroscopy, Intermetallics, 34 (2013) 159-161

S.M. Dubiel, J. Cieślak, M. Reissner, σ Effect of magnetism on the lattice dynamics in the σ -phase Fe-Cr alloys, Eurphys. Letters, 101 (2013) 16008

Informacja/Contact:

prof. dr hab. S. M. Dubiel, AGH, WFilS, ul. Reymonta 19a, D-10/115, tel. +48 12627 2973, e-mail: Stanislaw.Dubiel@fis.agh.edu.pl, <http://www.ftj.agh.edu.pl/~Dubiel>

dr inż. Jakub Cieslak, WFilS, ul. Reymonta 19a, D-10/115, tel. +48 12627 4155, e-mail: Jakub.Cieslak@fis.agh.edu.pl