

Streszczenie

Praca jest przykładem wykorzystania metody *ab initio* w obszarze teorii sprężystości, co pozwala na wyznaczenie stałych sprężystych oraz materiałowych, wskazując na ograniczenia precyzji metody, w przypadku konkretnych metali przejściowych. Przeprowadzona została dyskusja, dotycząca zastosowania funkcjonałów innych niż Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE), wykazujących dużą zgodność z pomiarami eksperymentalnymi. Ponadto przedstawione i opisane zostały zjawiska fizyczne, obserwowane w strukturach krystalicznych, będące efektem przykładania naprężeń ścinających, będące w ostatnich latach przedmiotem intensywnych badań w obszarze fizyki materiałów.

Głównym celem pracy, jest zbadanie własności izotropowości sprężystej w obrębie ziarna, występującej w stopach tytanu. Izotropowość sprężysta jest niezwykle unikatową własnością w strukturach krystalicznych, a jej natura ma charakter kwantowy, wynikający z rozkładu orbitali atomowych, będąc tym samym niemożliwą do wyjaśnienia w oparciu wyłącznie o własności elektrostatyczne. Przedstawione zostały wyniki prac teoretycznych opartych na teorii funkcjonału gęstości i metodach statystycznych, pozwalających wyznaczyć stężenia i właściwości mechaniczne izotropowo sprężystych stopów β -tytanu z wanadem, oraz tytanu z molibdenem. Rozprawa dostarcza również potwierdzenie parabolicznej zależności współczynnika anizotropii od liczby elektronów walencyjnych na atom. Sugestia o istnieniu kwadratowej korelacji między współczynnikiem anizotropii a liczbą elektronów walencyjnych na atom pochodzi z drugiej połowy XX wieku, jednak brak istniejących, wówczas narzędzi pozwalających rozstrzygnąć te kwestie, pozostawiał tę hipotezę niepotwierdzoną.

Praca podejmuje również rozważania odnoszące się do umocnienia plastycznego, poprzez przemianę tzw. TWIP/TRIP (Twinning Induced Plasticity/Transformation Induced Plasticity) w stopach na bazie tytanu, które w ciągu ostatnich lat stanowią niezwykle atrakcyjny przedmiot badań z uwagi na ich znaczenie dla przemysłu. Przemiana TWIP/TRIP jest niezwykle popularna i pożądana w różnego rodzaju stopach stosowanych do tworzenia elementów o wysokim ryzyku kolizji.

Poza pracami teoretycznymi, w pracy przedstawiono również wyniki eksperymentalne dające możliwość poznania głównych cech izotropowo sprężystego stopu tytanu z wanadem, a także tytanu z niobem, który przedtem nie był badany. Wytworzenie i zbadanie tej klasy materiałów, otwiera nowe możliwości tworzenia trwalszych i odporniejszych na zmęczenie stopów, umożliwiających redukcję masy konstrukcji.