



Posudek na diplomovou práci

## STUDIUM SLITIN S VYSOKOU ENTROPIÍ $HfNbTaTiZr$

diplomant: Bc. Štěpán Nekvinda, KIPL-FJFI-ČVUT

vedoucí práce: Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.

oponent: doc. Ing. Hanuš Seiner, Ph.D., DSc., Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.

Předkládaná diplomová práce se zabývá teoretickými modely fázových diagramů kovových slitin s motivací použít tyto modely pro predikci fázových transformací ve vysoce entropických slitinách, konkrétně v žárupevné slitině  $HfNbTaTiZr$ . To je velmi atraktivní téma, kombinující v sobě fyzikální metalurgii a termodynamiku tuhých roztoků, navíc se silnou motivací z hlediska průmyslových aplikací (vysoce entropické slitiny jsou v současnosti považovány na velmi nadějně kandidáty pro funkční součásti vystavené extrémním teplotám např. v tokamacích) i z hlediska základní fyziky pevné fáze.

Struktura práce je pro takový účel zvolena velmi logicky. V první kapitole jsou představeny vysoce entropické slitiny a jsou popsány hlavní efekty, k nimž v mřížce takových slitin dochází, v druhé kapitole je přehledný úvod do termodynamiky slitin a popis teoretických nástrojů pro použité výpočty. Třetí část práce představuje výsledky. I ty jsou členěny v logické posloupnosti, kde diplomant nejdříve na čistých kovech ověřil správné nastavení parametrů Gibbsových potenciálů, potom provedl testy na zvolených binárních kombinacích a nakonec se výpočet pokusil aplikovat na zkoumanou slitinu. Výsledek ukázal tendenci hcp fáze obohacovat se (oproti bcc fázi) o Hf a Zr, což je v dobré shodě s experimentálním pozorováním. Z tohoto lze usoudit, že zvolený modelovací přístup dokáže určit energeticky výhodné prvkové složení HEA pro danou strukturní fázi, což je velmi hodnotný poznatek.

K obsahové stránce práce bych měl tři dotazy, ke kterým bych byl rád, aby se diplomant vyjádřil v rámci obhajoby:

- 1. Jaký je vztah mezi vysokou entropií slitiny  $HfNbTaTiZr$  a jejími technologickými vlastnostmi, tedy vysokou pevností za vysokých teplot a zároveň tvárností za pokojové teploty?*
- 2. Odkud byly brány párové interakční parametry pro výpočty binárních a HE slitin a jak se tyto parametry liší v závislosti na struktuře (BCC/HCP/FCC)?*
- 3. Jaký je soulad mezi stabilitou fázi predikovanou Vaším výpočtem a experimentálním pozorováním popsaným v článkách [34,35]?*

Práce je po grafické i formální stránce připravena dobře, obrázky jsou přehledné a ve většině případů dobře okomentované, to samé platí o teoretických pasážích práce (termodynamika CALPHAD a úvod do DFT). Kvalitu práce ale částečně snižuje nedůslednost a nepečlivost v zacházení s literaturou i s vlastními výsledky. Především jsou velice matoucí způsobem interpretována experimentální data z článků [34,35], kde autor uvádí, že slitina za pokojové teploty je jednofázová s bcc mřížkou, zatímco experimentální data z [34,35] i CALPHAD simulace ukazují, že bcc mřížka je naopak za pokojové



teploty metastabilní a po žíhání jsou na pokojové teplotě přítomny precipitáty stabilní fáze hexagonální (případně fcc). Důvodem k této zmatečné interpretaci je, že autor v textu volně zaměňuje teplotu, při které je fázové složení určováno, s teplotou žíhání. Rovněž nejsou nijak komentovány transformační teploty odhadnuté z CALPHAD výpočtu, přestože se jedná o jeden z hlavních výsledků. Chybí jakákoliv diskuze, proč zůstává bcc fáze zachována i hluboko pod beta-transus teplotou, přestože materiál nebyl zakalen. A přitom diplomant v úvodní kapitole správně a s porozuměním popisuje efekt pomalé difuze, typický pro HEA, který nabízí přímočaré vysvětlení zachování metastabilní fáze i při pomalém ochlazení.

Rovněž fakt, že fcc fáze, ač experimentálně pozorovaná, není podle CALPHAD výpočtu nikdy energeticky preferovanou fází, není v práci vůbec nijak komentován. Logickým krokem by bylo provedení dalšího výpočtu stability fází, tentokrát pro bcc-matici ochuzenou o Hf a Zr v důsledku precipitace stabilní hcp fáze. S takovou diskuzí by práce byla výrazně kompletnější a výsledky věrohodnější.

Za další ukázky toho, že práci by prospěla pečlivější revize a rozšíření, lze považovat například:

- překlep přímo na titulní straně (alespoň ve verzi, kterou jsem dostal k oponentuře), kde je v anglickém názvu jako chemická značka místo Zr pouze Z
- opakování téže rovnice v úvodní kapitole (rovnice (1) a (6))
- citování obrázku č. 1 jako přejatého z literatury [11], přičemž v článku [11] se takový obrázek vůbec nevyskytuje, navíc neukazuje to, co je tvrzeno v textu, tedy že by snad slitina CoCrFeMnNi měla být za pokojové teploty jednofázová (grafy končí vysoko nad pokojovou teplotou, navíc i u této slitiny jsou vidět nepopsaná fázová pole směřující do nižších teplot)
- odkazování se na Tabulku 1 jako na „Obrázek 1“ a odkazování se na rovnice bez závorek kolem čísla odkazu
- citování článku [12] jako a Obrázku 4 jako „Výsledku experimentu“, když článek [12] je čistě simulační práce, navíc obrázek je bez čtení daného článku zcela nesrozumitelně okomentován
- používání termínu „unární slitina“ pro čisté kovy (pokud se termín sporadicky vyskytuje v literatuře, např. Choi et al., NJP 2018, jedná se pouze o nepochopení významu slova alloy ze strany nerodilého mluvčího)

Celkově práci hodnotím kladně, její téma je atraktivní a výsledky ukazují, že se diplomant dobře seznámil s teoretickými modely CALPHAD a dokázal je aplikovat pro zvolený materiálový systém. Práci **doporučuji k obhajobě**, a to (s ohledem na výše zmíněné nedostatky) s **navrženým hodnocením C (dobře)**.

V Praze, 7. září, 2021

.....  
Hanuš Seiner