

2019/2020 I. Félévi munkabeszámoló
Temesi Ottó
Anyagtudomány doktori program
Témavezető: Nguyen Quang Chinh -ELTE
és Varga Lajos Károly – Wigner Fizikai Kutatóközpont

Dolgozat címe:

Nagyentrópiás szuperötvözetek tervezése és vizsgálata magas hőmérsékletű alkalmazásokhoz.

Bevezetés

Az ötvöztés mindig is a tulajdonságok javításának az eszköze volt a fémek tudományában. Az alapcél, hogy a képlékenység megőrzésével növelni lehessen a szilárdságot. További igényként jelentkezik, hogy az ötvözet a nagy szilárdságot őrizze meg a lehető legmagasabb hőmérsékletig (refractory) és lehetőleg minél korrózióállóbb legyen.

A több komponensű (4-5 komponens v annál több) és összemérhető koncentrációjú ötvözetek létrehozásában áttörés 2004-ben történt. Ezen anyagcsaládot a szerzők „Nagyentrópiás” vagy rövidítve „HEA” ötvözeteknek nevezték el. Ezeket figyelembe véve speciális alkalmazásokhoz különleges és komplex tulajdonságokkal felruházott ötvözetek tervezhetők.

A HEA ötvözet egy rövidtávon torzult, de hosszútávon rendezett kristályszerkezettel rendelkezik. Ennek következménye, hogy lehetővé teszi a kémiai összetétel folytonos „hangolását” mind az elem fajtáját, mind koncentrációját illetően.

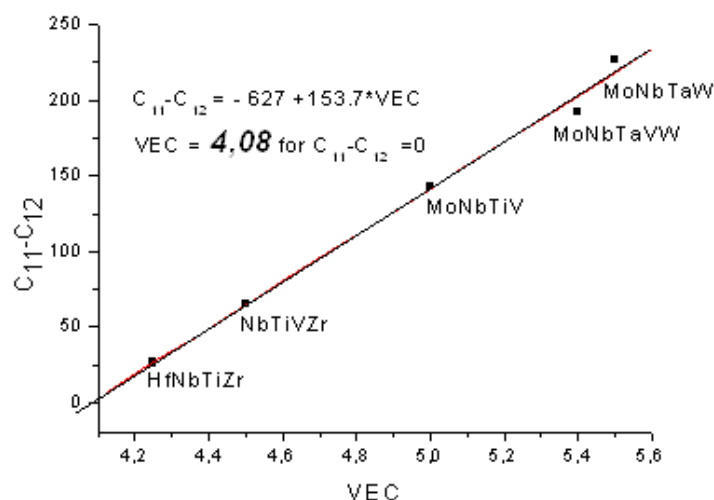
A problémafelvetés alapját az adja, hogy megtalálható-e az az összefüggés ami az ötvözet alkotó elemek tulajdonságaiból becsülhetővé teszi a szilárd – szivós határt. Ezáltal lehetővé téve bizonyos tulajdonságok tervezhetőségét, becslését. A kutatómunka ezen összefüggés határérték megtalálása és kísérleti úton történő igazolása valamint magas hőmérsékleten melegsilárd ötvözet előállítására.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése:

Az első félévben a munka több párhuzamosan futó feladatra osztható:

1. A téma szakirodalmi kutatása folyamatban van, mely munka átível a további félévekre. Itt elsősorban az egyfázisú HEA rendszerek megismerése a cél, azok mechanikai tulajdonságainak illetve összetételnek korrelációs vizsgálatával.
2. A cikkek feldolgozása mentén az összetételek és mechanikai illetve szerkezeti tulajdonságok, paraméterek kísérleti és elméleti számított (pl: Vitos Levente ab initio számításai) adatainak, paramétereinek gyűjtését elkezdtem egy adatbázisba. Ezen adatok lehetőséget biztosítanak a későbbi ötvözet tulajdonság tervezhetőségi elmélet igazolására, korrelációk felismerésére, kísérleti eredmények illeszthetőségére.
3. Ehhez egy olyan programon dolgozunk, mely az periódusos rendszer HEA releváns elemeinek adatait és egyéb számított paramétereket tartalmazza mint, például: a%, w%, mol%, moláris tömeg, sűrűség, olvadáspont, atomátmérők, W-S átmérő, W-S térfogat, atomtérfogat, rácsparaméter, VEC típusok, VED, Z típusok, n(ω), rácstípusok, Young's modulus, kohéziós energia, térfogati és nyírési modulus...stb.
4. Mintaelőállítás feltételeit megteremtettük a következők szerint:

- a. A különböző elemek minimum 99,9%-os tisztaságban beszerzésre kerültek tömbi, por, granulátum, drót és lemez formában. Ezen elemek: Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Mn, Fe, Co, Rh, Ni, Cu, Zn, Cd, Al, Ga, In, Sn, Pb, Bi
 - b. Mintamegmunkáláshoz a megfelelő csiszoló elrendezés megtervezésre és kialakításra került.
 - c. A mintavágáshoz a megfelelő elrendezés megtervezésre és kialakításra került.
5. Kísérlet és összetétel tervezés: A tervezés során a kiválasztott összetétel szerinti elemek páronkénti kétalkotós egyensúlyi fázisdiagramok elemzését végeztük el. Alapvetően két irányba történt a tervezés:
- a. Folytatjuk a Ni alapú ötvözetek példáját, és olyan nagyentrópiás ötvözetet tervezünk ahol az FCC (gamma) szerkezetű mátrix adja a szívósságot és a vele koherens L_{12} szerkezetű és $Ni_3(AlTi)$ alapú γ' precipitátumok adják a szilárdságot. Az irodalom tanulmányozása alapján kiinduló ötvözetek a következők: Ni fő komponenssel Co/Fe/Cr/Al/Ti/Fe/Mo/Ta ötvözőkkel.
 - b. A magasabb működési hőmérséklet elérésére, BCC vagy B2 szerkezetű magas olvadáspontú, korai átmeneti (refractory) fémekből tervezzük készíteni az ötvözetünket, úgy hogy teszteljük feltevésünket, miszerint az egy atomra jutó valencia elektronszám rendelkezik egy optimum értékkel ahol a nyírási modulus minimális és ez adja az ötvözetszívósságát, azaz egyfajta választóvonalat képvisel a szívós-kemény tulajdonságmezők között. Kiinduló HEA ötvözet alkotóink: Ti-V-Nb-Mo-Al-Zr-Hf-Ta-W. Ennek a sejtésünknek az igazolásához Vitos Levente professzor elméleti módszerét tervezzük alkalmazni.
6. Vitos Levente professzor elméleti számolásaiból (1) vettünk egy sorozatot. Ezen összetételekhez tartozó elméleti úton számolt $c_{11}-c_{12}$ értékeket ábrázoltuk a VEC függvényében. Ezek alapján extrapolálható - az illetékt egyenes alapján -, hogy az egy behatárolható VEC érték körül nullává válik a $c_{11}-c_{12}$ mennyiség, ahol elméletileg legnagyobb alakíthatóság elérhető.



Ezek alapján ki szeretnénk egészíteni $VEC = 3.75 - VEC = 4,1$ -ig a számításokat, hogy látható legyen a metszet vagy a minimum érték. Majd ezeket kísérleti adatokkal szeretnénk korreláltatni.

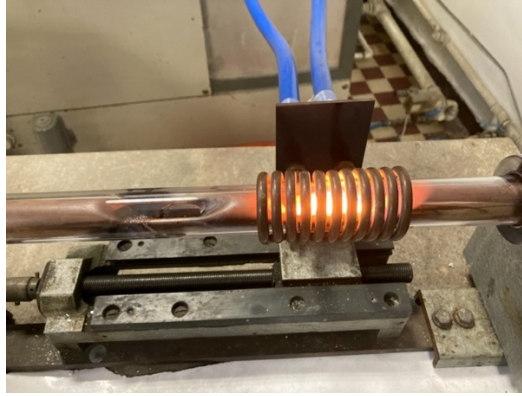
7. Mintaelőállítás módszerei:

- a. Kismennyiségű (10-20g) kísérleti mintákhoz hidegtégelyes indukciós olvasztási eljárással történt.
 - b. Nagymennyiségű (100-1000g) kísérleti minták előállításához egy vákuumozható, kerámiatégelyes indukciós olvasztó építése befejezési szakaszban van. Ezzel a berendezéssel nagyobb és szabályozható alakú minták állíthatók elő első körben 1500°C-ig. Második lépcsőben egy hűtött Tantál vagy Wolfram betétes tégely - 2000°C feletti olvadáspontú ötvözet összetételekhez - fejlesztését tervezzük megoldani.
8. Mintaelőállítás: a VEC szám és prognosztizált fázis szerkezet tervezéssel a Ni alapú rendszerben 4 féle összetételt, míg egyfázisú rendszerben 9 féle összetételt valósítottunk meg. Az elemek egymástól jelentősen eltérő olvadáspontja miatt nagy hangsúlyt kellett fektetni a megfelelő „máglya” kialakításra a mintakészítés során a megfelelő homogén ötvözet elérése céljából. Ezt egészítettük ki felezéssel illetve pulzáló újraolvasztással inert gáz (Ar) atmoszférában, Ti getterrel.

	Minta megnevezés	VEC		Minta megnevezés	VEC
1	YTiZrHf	3,75	1	NiCrCoFeMo	8,03
2	TiZrHf	4,00	2	NiAlTiCoCrFe 2.	8,06
3	TiZrHfNb 2.	4,10	3	NiAlTiCoCrFe 1.	8,07
4	TiZrHfNb 1.	4,24	4	NiAlTiCoCrFeMoTa	8,07
5	TiZrHfNbV	4,40			
6	TiZrVNb	4,50			
7	TiZrVNbTa	4,60			
8	TiVNbMo	5,00			
9	VNbMoW	5,50			

Néhány példa a létrehozott mintákra és előállításra:





9. Mintavizsgálat tervezés: Megterveztük a létrehozott minták roncsolásos és roncsolásmentes módszerekkel történő vizsgálati sorát a megfelelő minta-preparációt követően:
- Mikro CT: térfogati porozitás vizsgálat
 - Sűrűségmérés
 - Pordiffrakciós mérés
 - Ultrahang-terjedés sebesség mérés (longitudinális és transzverzális)
 - Keménység mérés
 - TG-DTA
 - Termomechanikai mérés
 - Pásztázó elektron mikroszkóp: töret és csiszolat, elemanalízis
 - Optikai mikroszkóp: szövetvizsgálat

Publikációk: Az egyfázisú HEA-k tervezési feltételeiről készül egy összefoglaló cikk melynek rész lesz a jelenlegi mintákon végzendő mérési eredmények.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben:

A félév során két kurzuson vettem részt:

- Rácshibák I. EA - FIZ/1/024
- Tömbi nanoszerkezetű anyagok EA - FIZ/1/040E

Konferenciák az aktuális félévben:

- XIII. Országos Anyagtudományi konferencia (OATK-2021) részt vettem ahol 20 különböző előadást hallgattam meg.
- Az ELTE anyagfizikai tanszékének szemináriumainak rendszeres hallgatója vagyok
- A Wigner Fizikai Kutatóközpont szemináriumainak alkalmi hallgatója vagyok