



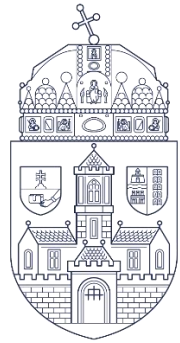
NEUMANN JÁNOS EGYETEM



INNOVATÍV JÁRMŰVEK ÉS
ANYAGOK TANSZÉK



Bay Zoltán
Alkalmazott Kutatási
Közhasznú Nonprofit Kft.



ÓBUDAI EGYETEM
ÓBUDA UNIVERSITY

MAGASHŐMÉRSÉKLETŰ FELHASZNÁLÁSRA SZÁNT NAGY ENTRÓPIÁJÚ ÖTVÖZETEK OXIDÁCIÓS VISZONYAINAK ÉS STABILITÁSÁNAK VIZSGÁLATA

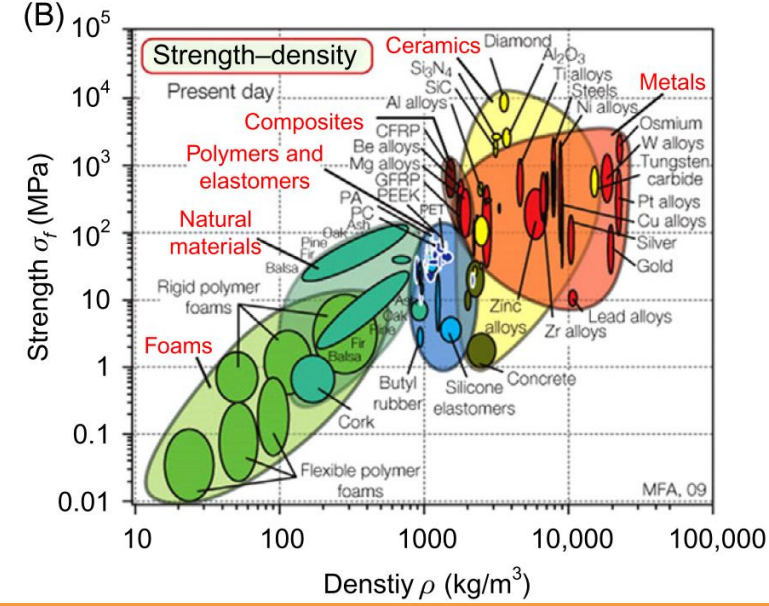
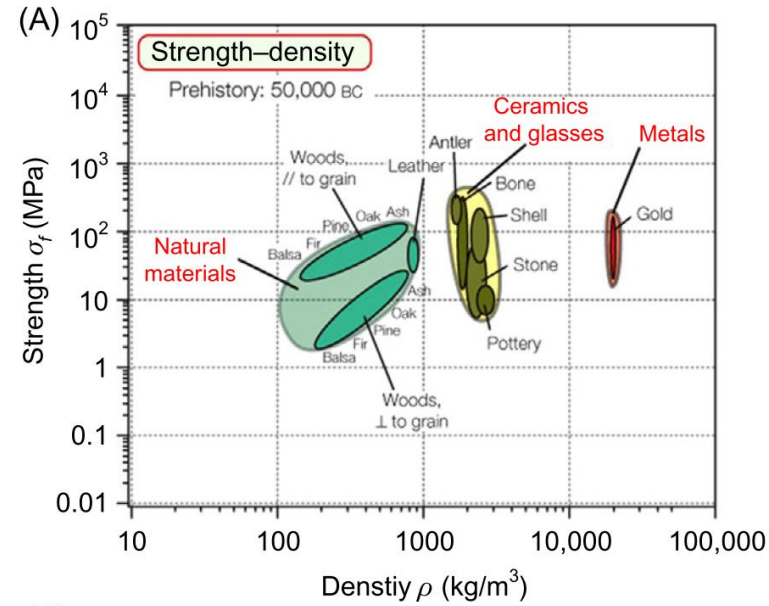
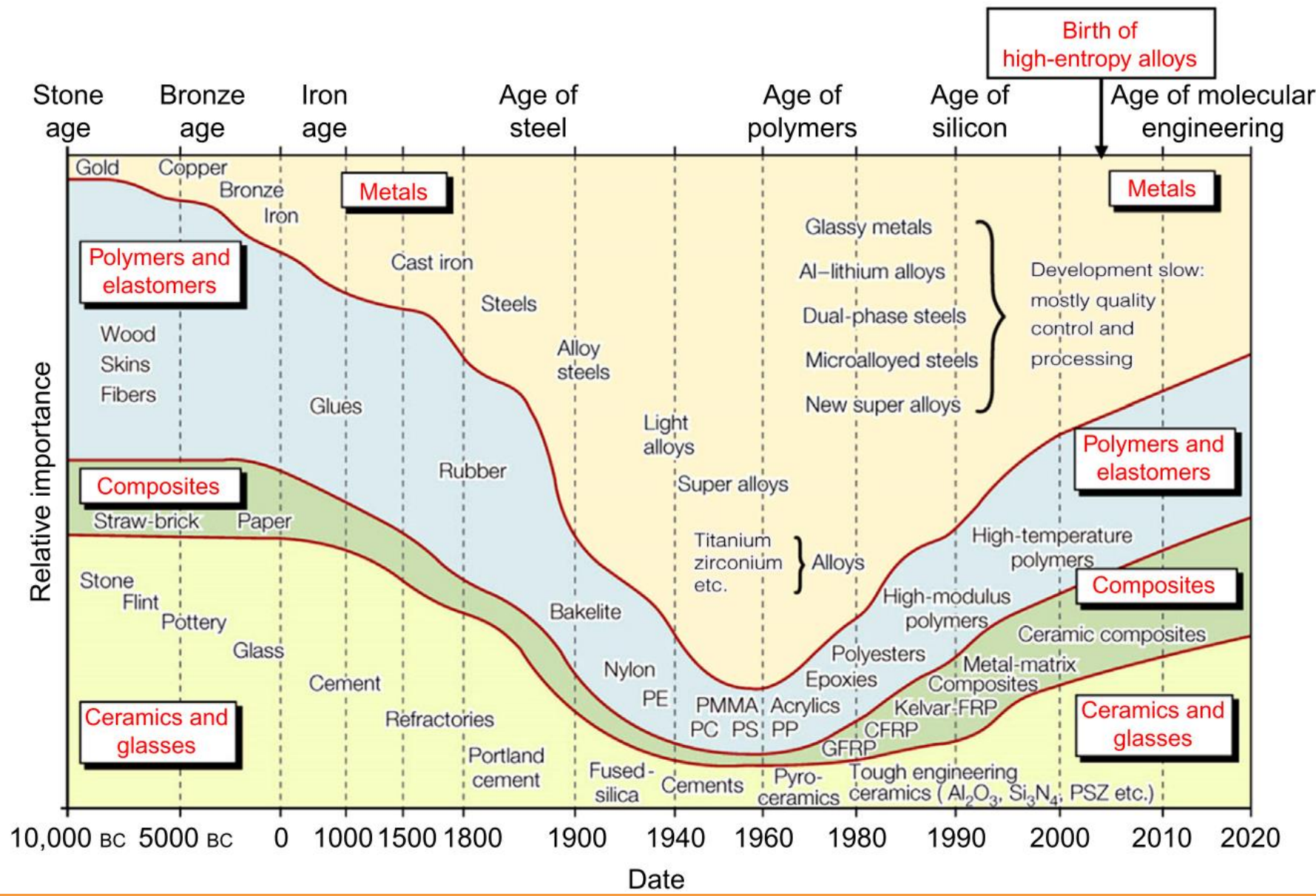
JUHÁSZ GERGELY

1. FÉLÉVES DOKTORANDUSZ HALLGATÓ
ANYAGTUDOMÁNYOK ÉS TECHNOLÓGIÁK DOKTORI ISKOLA

TÉMAVEZETŐK:

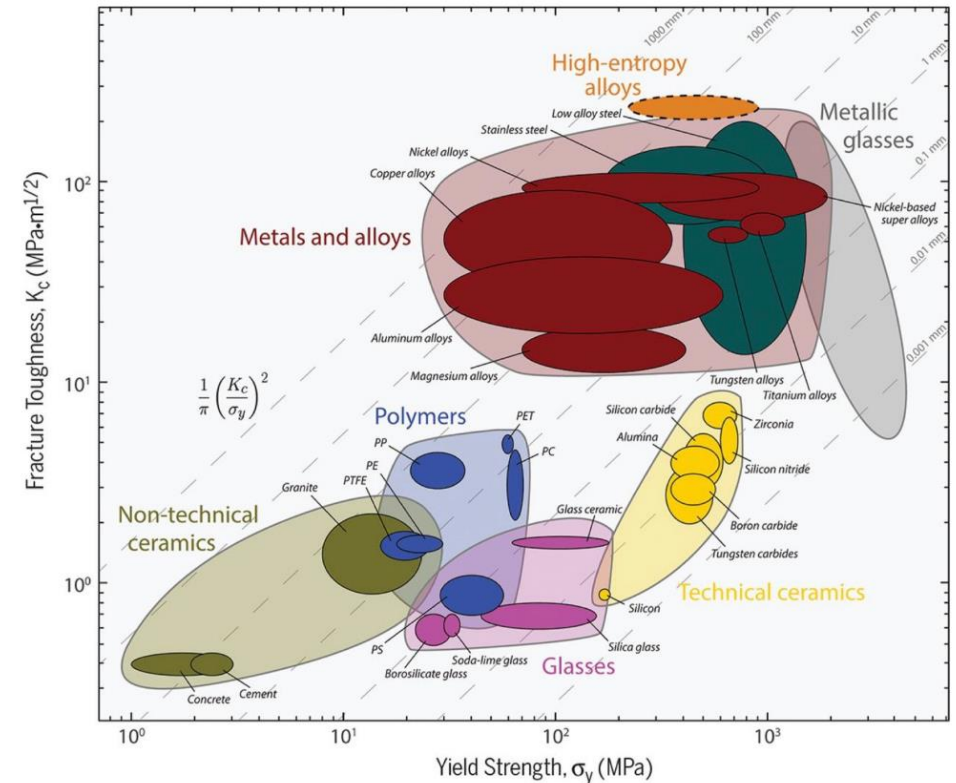
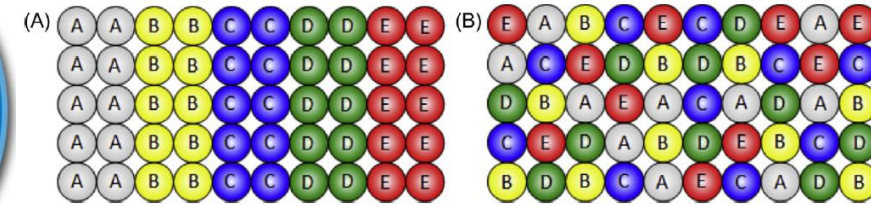
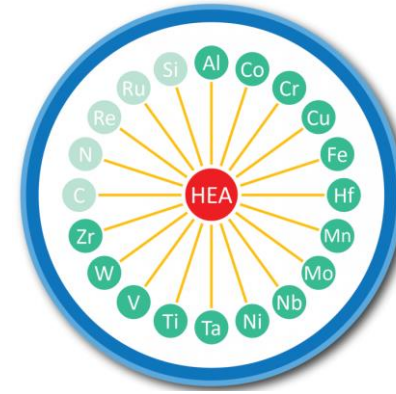
DR. FÁBIÁN ENIKŐ RÉKA, DR. VIDA ÁDÁM

Bevezetés



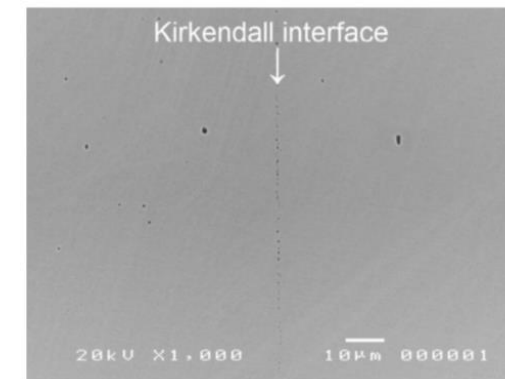
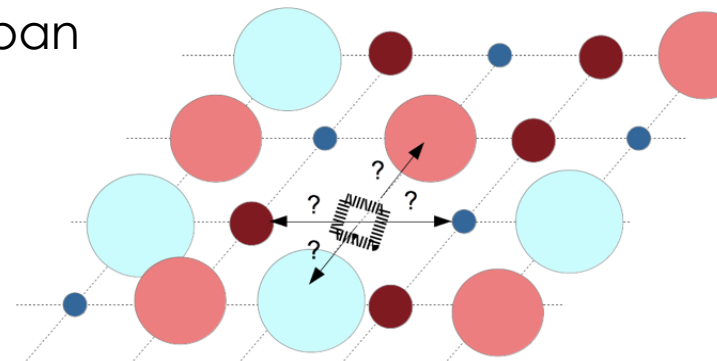
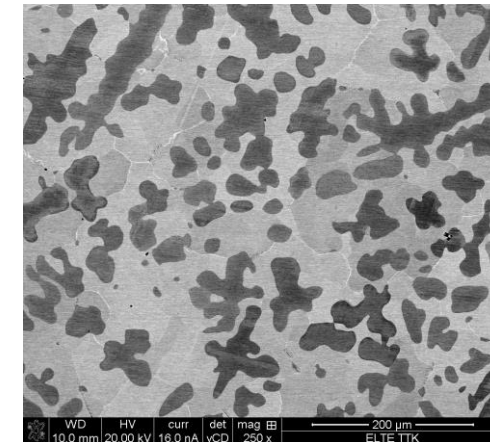
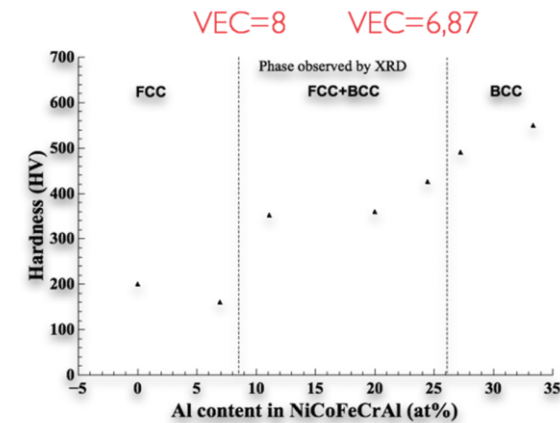
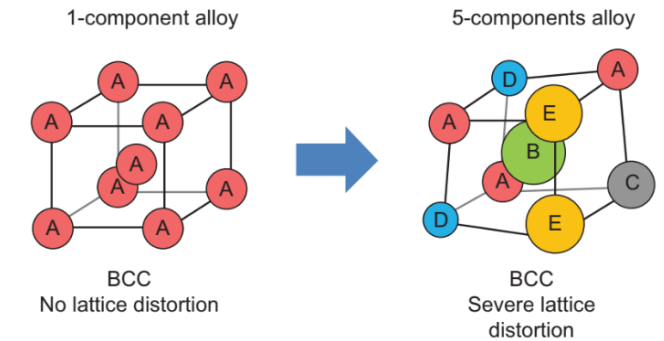
Nagy-entrópiájú ötvözetek

- Olyan ötvözetek, amelyekben öt vagy több fő elem azonos atomarányban van jelen (5-35%), és további összetevők vannak jelen kisebb mennyiségben (<5%)
- Rendkívüli tulajdonságok
 - Szilárdság, keménység
 - Kopásállóság
 - Korrózióállóság
 - Termikus stabilitás
 - Szívósság és alakíthatóság
 - Sűrűség
- A nagy-entrópiájú ötvözetek különböző rácsterkezetekben kristályosodhatnak:
 - TKK, LKK, HCP
- Testreszabhatóság
 - Az összetétel beállítható az egyes alkalmazásokhoz kívánt tulajdonságok elérése érdekében, ami rendkívül sokoldalúvá teszi őket.



A nagy-entrópiájú ötvözetek 4 alapeffektusa

- Nagy entrópia
 - stabil szilárd oldat fázis az intermetallikus vegyületekhez képest
- Erős rácsstorzulás
 - Megváltozott kristályszerkezet
 - ↳ Az ötvözet mechanikai tulajdonságai jobbak lehetnek, de romolhat a vezetőképessége
- Koktél hatás
 - Az összetétel és az ötvözet elkészítésétől függően egy vagy több fázisú
 - ↳ A tömbi anyag tulajdonságai az alkotó fázisok összességének hozzájárulásából adódnak.
- Lassú diffúzió
 - Jelentős ingadozás a rács potenciális energiájában (RPE)
 - Alacsony RPE-vel rendelkező helyek csapdaként működnek és gátolják az atomi diffúziót
 - ↳ lassú kinetikai átalakulás



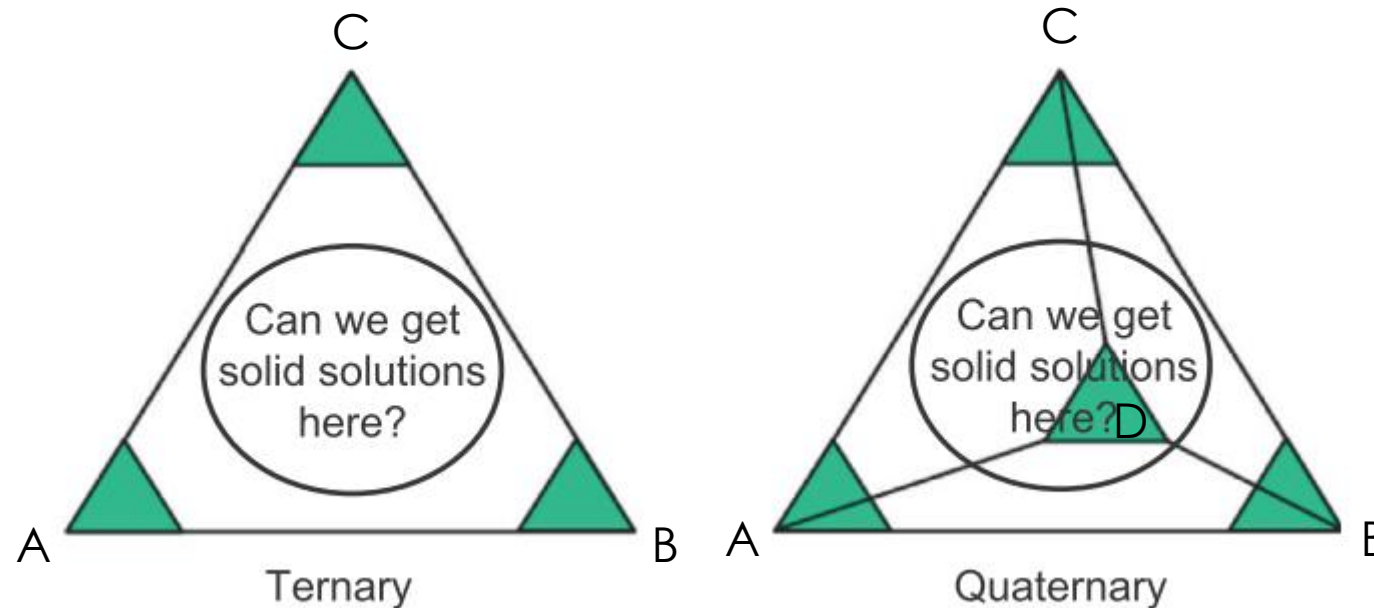
Megfontolások a nagy-entrópiájú ötvözetek esetében

- Ha 60 elemből választhatunk

$$N = (100/x)^{C-1} \quad \begin{array}{l} C - A \text{ komponensek száma} \\ X - \text{Az összetétel változása \% -ban} \end{array} \longrightarrow \begin{array}{l} 10^{177} \text{ lehetséges ötvözet,} \\ 0.1\% \text{ összetétel változtatás esetén} \end{array}$$

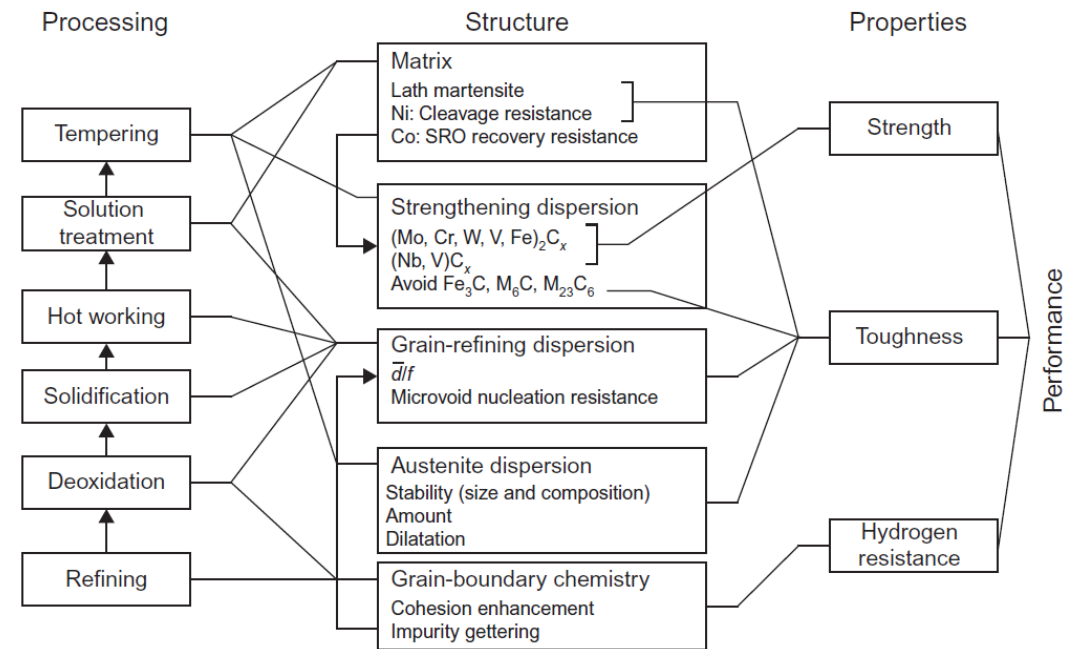
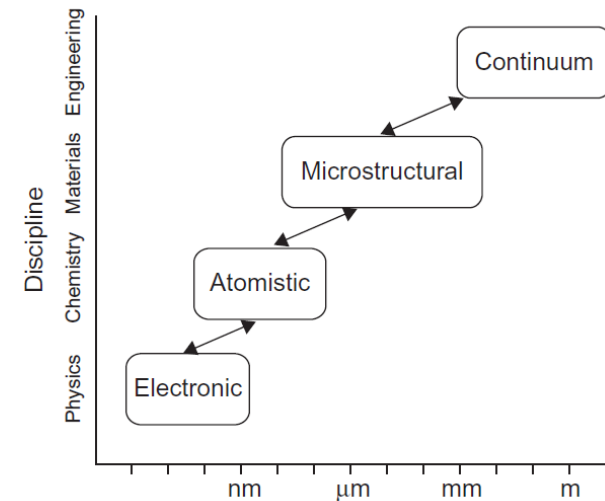
Még ha 40 elemre csökkentjük az elemeket, és a kompozíciós különbség 1%,
akkor a lehetséges ötvözetszám 10^{78}
 10^{66} atom van a galaxisunkban

Ha ennyi lehetőség van, akkor hogyan tervezhetjük meg ezeket az ötvözeteket?



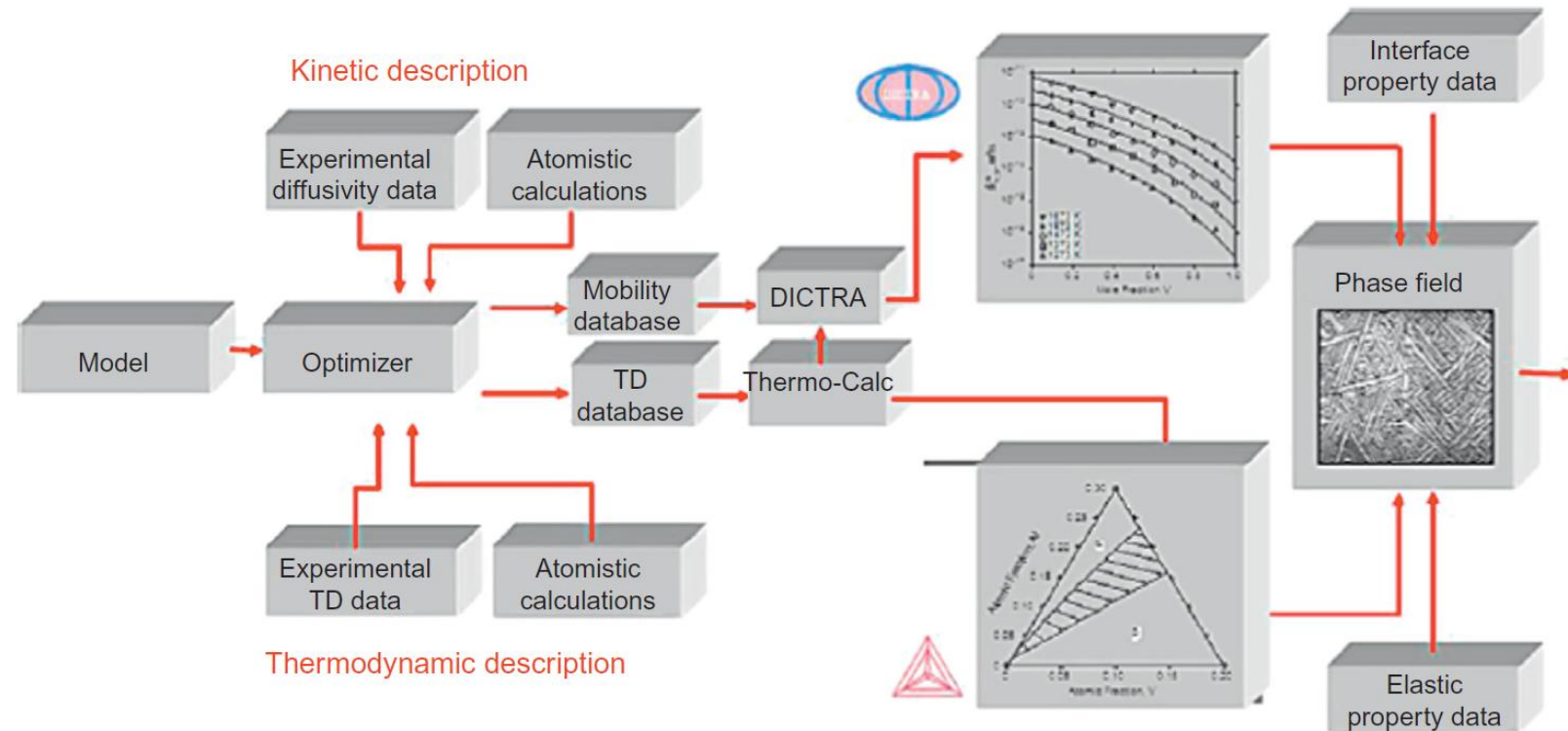
Számítógépes tervezési lehetőségek

- Fejlődő multidiszciplináris terület a termékek, azokat alkotó anyagok és a hozzájuk kapcsolódó feldolgozási módszerek tervezésére, az anyagmodelleket nanométertől a méterig terjedő hosszúsági skálákon összekapcsolva.
- Az ICME-n belül számos módszer létezik
 - **CALPHAD**
 - ab-initio methods
 - density functional theory (DFT)
 - Monte Carlo (MC)
 - molecular dynamics (MD)



CALPHAD (CALculation of PHAse Diagrams)

- Termodinamikai adatbázisok gyűjteménye
- Meghatározható:
 - relatív fázisstabilitások
 - az egyes összetevők oldhatósága
 - átmeneti hőmérsékletek
 - sebességállandók
 - fázisarányok



Termodinamikai modellek

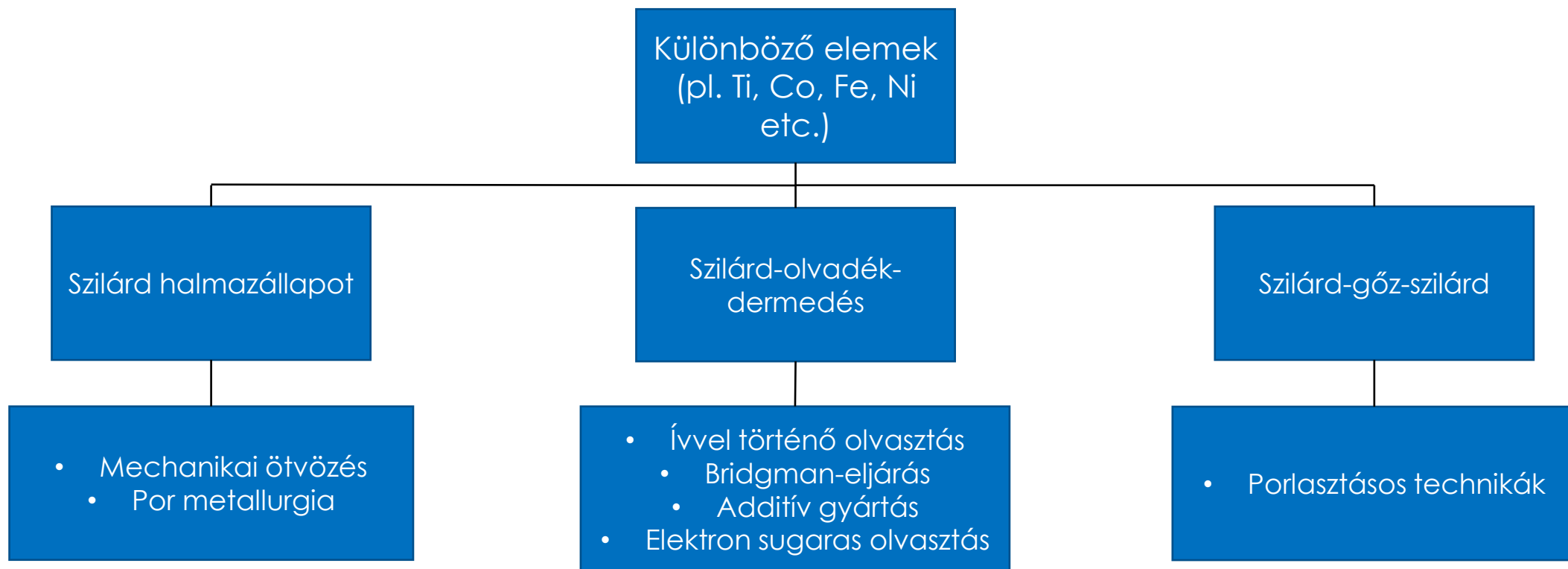
Kísérleti adatok és értékelés

Bináris és hármas rendszerek

A Gibbs-szabad energia minimalizálása

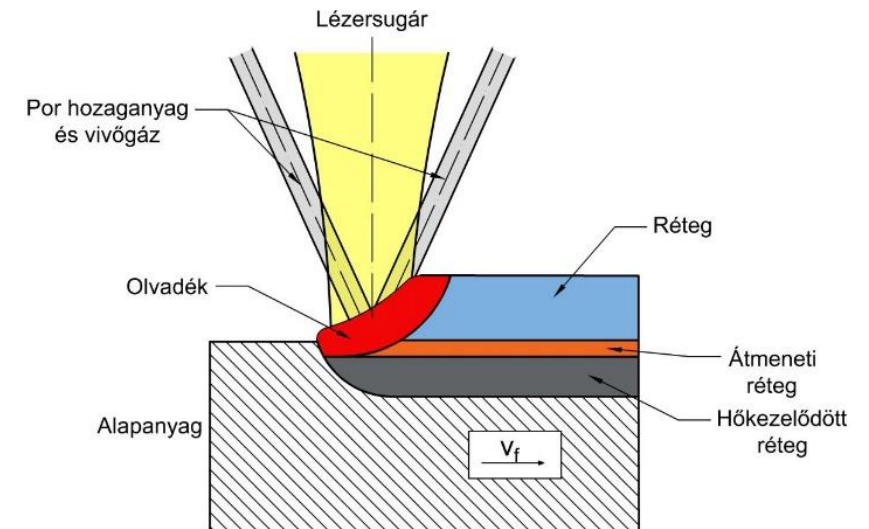
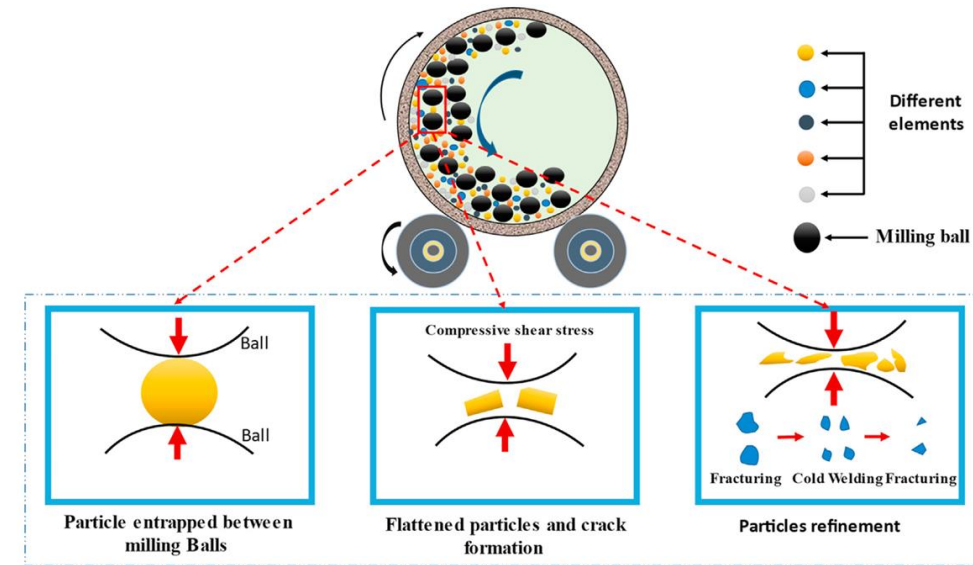
Adatbázis fejlesztés

Szoftver eszközök



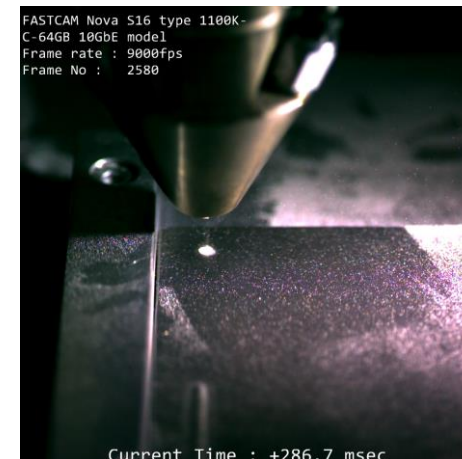
Lehetséges előállítási módszerek

- Mechanikai ötvözés
 - Előnye: precízen beállítható mikroszerkezet és tulajdonságok
 - Hátránya: az eredmény por, további technika kell
- Ívvel történő olvasztás
 - Előnye: nagy hőmérséklet
 - Hátránya: korlátolt térfogat és geometria, többször ismételni kell a folyamatot, hogy homogén mintát kapjunk
- Lézeres additív gyártás
 - Előnye: alak adható a darabnak már az ötvözet létrehozása közben, a paraméterekkel befolyásolható a kialakuló szerkezet és tulajdonság, koncentrált hőbevitel és gyors hűlési sebességek
 - Hátránya: a technológiához megfelelő port kell előállítani / beszerezni



Jövőbeli tervek

- Nagy-entrópiájú ötvözetek előállítására Laser Metal Deposition technológiával
 - 2 lehetséges megoldás:
 - in-situ csak homogénean kevert porral, amely tartalmazza a kívánt elemeket
 - Előre ötvözött porral
- Nagy hőmérsékletre szánt (refractory) nagy-entrópiájú ötvözetek oxidációs viszonyainak és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata
 - Különböző elemek szublimációja, amely megváltoztatja a RHEA felületének tulajdonságait.
 - Szobahőmérsékleten ridegek



Tervek a második félévre

- Olyan Mo,Ti,W,Ni ötvözet irodalomkutatása, amelynek jó eredményei vannak a szakirodalomban
- Heti szinten gyűjteni irodalmakat, van-e valami új publikáció az adott ötvözettel kapcsolatosan
- Irodalomkutatás, hogy milyen alaplemezre készítenek RHEA ötvözeteket (teoretikus rácsállandó, hőtágulási együttható, stb.)
- Cél: csökkenteni a magashőmérsékleten történő felszíni szublimációt (adalékolás?)
- Első próbakísérletek a kiválasztott ötvözettel (in-situ, mechanikai ötvözött, szükséges-e további hőkezelés)

Publikációk

- The effect of building strategies on tensile strength of additively manufactured parts by laser metal deposition (beküldve)
- Investigation of Co-Cr alloy layer prepared by laser metal deposition (beküldve)
 - Institute of Physics (IOP) Conference Series: Materials Science and Engineering
- Lehetőségek a nagy-entrópiájú ötvözetek tervezésére (beküldve)
- Nagy-entrópiájú ötvözetek alkalmazhatóságának lehetőségei (beküldve)
 - Mérnöki Szimpózium a Bánkin Előadásai
- Production Methods of High-Entropy Alloys (beküldve)
- Applicability of high-entropy alloys (beküldve)
 - Trans Tech Publications Ltd. egyik folyóiratába

Konferencia részvételek

- XIV. Országos Anyagtudományi Konferencia
 - Poszter + publikáció
- ISCAME - 9th International Scientific Conference on Advances in Mechanical Engineering
 - Előadás + publikáció
- Mérnöki szimpózium a bányában 2023
 - Előadás + publikáció
- Nagy Energiasűrűségű Ankét
 - Előadás
- MASZK 2023
- 43. Balatoni Ankét
- Messer Hegesztéstechnikai Innovációs Fórum 2023
 - Kiállító

Tantárgyak és oktatási tevékenység

Felvett tárgyak:

- Koncentrált energiabevitelű anyagtechnológiák
- Anyagtudomány alapjai
- Kutatási project I.
- Kutatási beszámoló I.

Oktatott tárgyak:

- Neumann János Egyetem:
 - 2óra/hét, Anyagvizsgálat, GMUSFKN-ANYVIZSG-1
 - 8 óra/félév, Anyagvizsgálat, GMUSFKL-ANYVIZSG-1
 - 6 óra/félév, Anyagismeret, GJARBAL-ANYAGISM-1
 - 2óra/hét, Műszaki informatika, GGEPBAN-MUSZINFO-1

Referenciák

- Murty, B.S. Yeh, J.W. Ranganathan, S. (2014). High-Entropy Alloys. Elsevier, ISBN: 978-0-12-800251-3
- Miracle, D.B. Senkov, O.N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. Acta Materialia, Volume 122, Pages 448-511. ISSN 1359-6454, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>.
- Kaufman, L., Agren, J., (2014). CALPHAD, first and second generation - Birth of the materials genome. Scr. Mater. 70, 3-6.
- Katz-Demyanetz, A. Gorbachev, I.I. Eshed, E. Popov, V.V. Bamberger, M. (2020). High entropy Al_{0.5}CrMoNbTa_{0.5} alloy: Additive manufacturing vs. casting vs. CALPHAD approval calculations. Materials Characterization, Volume 167. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2020.110505>.
- S. El-Haddad, High Entropy Alloys: The Materials of Future, Int. J. Mater. Technol. Innovation, 2 (2022) 67-84.
- A. Kumar, R. Chandrakar, V. Dubey, M. Michalska-Domańska, High-Entropy Alloys: Processing, Alloying Element, Microstructure, and Properties, de Gruyter, Berlin, 2023.



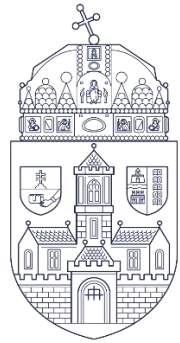
NEUMANN JÁNOS EGYETEM



INNOVATÍV JÁRMŰVEK ÉS
ANYAGOK TANSZÉK



Bay Zoltán
Alkalmazott Kutatási
Közhasznú Nonprofit Kft.



ÓBUDAI EGYETEM
ÓBUDA UNIVERSITY

KÖSZÖNÖM A FIGYELMET!