

## HEADesign

Entwicklung eines Designtools für Hochtemperaturwerkstoffe auf Basis des Hochentropie Legierungskonzeptes

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft, 24. AS PdZ nationale Projekte 2017	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.05.2018	<b>Projektende</b>	28.02.2022
<b>Zeitraum</b>	2018 - 2022	<b>Projektlaufzeit</b>	46 Monate
<b>Keywords</b>	Hochentropielegierung, Hochtemperaturwerkstoffe, Material Design Tool		

### Projektbeschreibung

Ziel des Projektes ‚HEADesign‘ ist es, ein geeignetes Paket von Material Design Tools für innovative Hochentropielegierungen zu entwickeln.

Die neuen Material Design Tools sollen es den beteiligten Firmen Böhler Edelstahl (BEG), Böhler Schmiedetechnik (BSTG) und RHP Technology GmbH (RHP) mittel- bzw. langfristig ermöglichen, zielgerichtet und computerunterstützt neue Legierungskonzepte für spezifische Anwendungsfälle sowie geeignete Verarbeitungsverfahren für Hochentropiewerkstoffe zu entwickeln. Im Rahmen dieses Projektes werden Multikomponenten - Legierungskonzepte verfolgt, die dem Hochentropiekonzept im erweiterten Sinne entsprechen und Konfigurations-entropien von typisch 1R bis 1,6R aufweisen (R=Gaskonstante).

Trotz des außergewöhnlichen kristallographischen Aufbaus und der vielversprechenden Eigenschaften konnte mit Hochentropielegierungen bisher kein kommerzieller Durchbruch erzielt werden, wofür in einem hohen Ausmaß das Fehlen geeigneter Tools für das Design der Werkstoffe und der Verarbeitungsprozesse verantwortlich ist. Hier setzt das Projekt HEADesign ein, das einerseits mit der Entwicklung von zuverlässigen Vorhersagemodellen für die Legierungszusammensetzung sowie der elastisch/plastischen Eigenschaften den ersten Baustein in Richtung wissensbasierter Materialentwicklung von Hochentropielegierungen legen soll. Andererseits sollen im Projekt Konzepte für die Herstellbarkeit dieser vielversprechenden Materialgruppe unter industriellen Bedingungen untersucht und so der Weg zu einem technologischen Durchbruch geebnet werden.

Der methodische Ansatz des Projektes beruht darauf, die Entwicklung der Material Design Tools mit der Entwicklung von Werkstoffkonzepten für (1) Heißpresswerkzeuge sowie (2) Turbinenscheiben zu koppeln, um so eine Validierung der Design Tools durchführen zu können. Dies soll die zukünftige Einsetzbarkeit der Design Tools in einem betrieblichen Forschungsumfeld sicherstellen. Für beide Anwendungsfälle werden Bauteile eingesetzt, welche hohen thermomechanischen Belastungen bei hohen Temperaturen unterliegen. Während die Heißpresswerkzeuge lediglich wenige Zyklen allerdings bei extrem hoher mechanischer Belastung ausgesetzt werden, handelt es sich bei den Turbinenscheiben um eine Kriech- sowie eine LCF-Ermüdungsbelastung. In beiden Fällen wird eine Erhöhung der heute typischen Spitzentemperaturen um ca. 100°C von ca. 1000°C auf 1100°C bei Heißpresswerkzeugen und von ca. 750°C auf 850°C bei Turbinenscheiben angestrebt. Die hohe technologische Expertise der beteiligten Unternehmenspartner bei Entwicklung und Verarbeitung hochlegierter

Werkstoffe zu Halbzeug und Bauteilen einerseits und die Expertise der beteiligten Wissenschaftspartner bei den materialphysikalischen Grundlagen und der Simulation von Materialien auf allen relevanten Längenskalen sind eine exzellente Ausgangsbasis für eine erfolgreiche Umsetzung der Ergebnisse dieses Projektes.

Das computerunterstützte Material Design Tool für Hochentropielegierungen soll den Grundstein für die Firmen BSTG, BEG, sowie RHP legen, um zukünftig eine internationale Spitzenposition als Technologieführer bei Produkten aus Hochtemperaturlegierungen einzunehmen. Die damit zunehmende Konkurrenzfähigkeit und der Ausbau der Herstellung von Hochtemperaturlegierungen wird langfristig zu einer Erhöhung des Marktvolumens, somit zu einer verbesserten Marktposition der beteiligten Unternehmen führen und damit neue Arbeitsplätze schaffen.

## **Abstract**

The aim of the project 'HEADesign' is to develop a suitable package of validated computational material design tools for innovative High Entropy Alloys (HEAs).

The new design tools are intended to enable the participating companies Böhler Edelstahl (BEG), Böhler Schmiedetechnik (BSTG) and RHP Technology GmbH (RHP) in the medium- and long term a targeted and computer-supported development of new alloy concepts for specific applications as well as suitable processing methods for HEAs. Within the scope of this project, multicomponent alloy concepts are investigated which correspond to the 'High Entropy' concept and exhibit a configuration-entropy of typically  $1R$  to  $1.6R$  ( $R = \text{gas constant}$ ).

In spite of the extraordinary crystallographic structure and the promising properties, no commercial breakthrough has been achieved so far with HEAs, for which the lack of suitable tools for the design of the materials and the processing processes is deemed as most responsible reason. This is where the HEADesign project focuses; it aims to develop reliable models and computational tools for the prediction of the alloy composition as well as elastic / plastic properties as a fundamental module to develop HEAs knowledge-based in future. Furthermore, also concepts for the manufacturability under industrial conditions of this promising material group are to be developed, thus paving the way for a technological breakthrough.

The methodological approach of the project is to link the development of the material design tools with the development of new HEA based material concepts for (1) hot-pressing tools as well as (2) turbine disks in order to validate the design tools simultaneously. This is to ensure the future applicability of the design tools in an industrial research environment. For both applications components are used which are exposed to high thermomechanical loads at high temperatures. While the hot-pressing tools are subjected to only a few cycles of extremely high mechanical loads, the turbine disks are subjected to creep- as well as a low-cycle fatigue load. In both cases, an increase of the typical limit temperature by approx.  $100^\circ\text{C}$  from  $1000^\circ\text{C}$  to  $1100^\circ\text{C}$  for hot pressing tools and from  $750^\circ\text{C}$  to  $850^\circ\text{C}$  for turbine disks is aimed.

The high technological expertise of the participating company partners in the development and processing of high-alloyed materials for semi-finished products and components on the one hand, and the expertise of the participating scientific partners in the fundamentals of materials physics as well as simulation of materials on all relevant length scales on the other hand, are an excellent basis for a successful implementation of the results of this project.

The computer-assisted material design tool for HEAs is intended to lay the foundations for the companies BSTG, BEG, and RHP, in order to seize an international top position as a technology leader in production and use of high-temperature alloys. Consequently, the increasing competitiveness and the expansion of the production of high-temperature alloys will lead to an increase in the market volume in the long term, thus improving the profitability of the companies involved and thus creating new jobs.

## **Projektkoordinator**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH

## **Projektpartner**

- voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH & Co KG
- voestalpine BÖHLER Aerospace GmbH & Co KG
- RHP-Technology GmbH