PL2N A

Paradigmenwechsel im Legierungskonzept von Leichtmetallen mit intrinsischer Nachhaltigkeit für Struktur-Anwendungen

Programm / Ausschreibung	Energieforschung (e!MISSION), Energieforschung, Energieforschung 4. Ausschreibung 2017	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.03.2018	**Projektende**	31.08.2021
Zeitraum	2018 - 2021	**Projektlaufzeit**	42 Monate
Keywords	High Entropy Alloys; Leichtmetallwerkstoffe, Mobilitätsanwendungen, Nachhaltigkeit		

Projektbeschreibung

Das Konzept der High Entropy Alloys (HEAs), bei denen mehr als 4 Elemente zu annähernd gleichen Teilen zusammenlegiert werden und idealerweise trotzdem eine simple Kristallstruktur ohne intermetallische Phasen ausbilden, hat in den letzten 10 Jahren eine Reihe von hochperformanten Legierungen hervorgebracht. Diese übertreffen den Stand der Technologie sowohl bzgl. absoluter erreichbarer Festigkeiten, sondern vor allem auch bzgl der erreichbaren Festigkeit relativ zum theoretischen Limit. Während moderne Legierungen aller Klassen üblicherweise bei deutlich unter 10% des theoretischen Absolutwertes technisch etabliert sind, können HEAs bis zu 25% ihrer theoretischen Festigkeit realisieren. Gleichzeitig deuten Forschungsergebnisse darauf hin, dass HEAs hinsichtlich Ihrer Toleranz gegenüber metallischer Verunreinigungen eine Steigerung um eine Größenordnung gegenüber kommerziellen Legierungen erreichen können. Dies würde bedeuten, dass EOLAbfälle wieder zu hochperformanten Werkstoffen umgesetzt werden können und damit ein massives Upcycling erfahren. Langfristig können die europäische und österreichische Wirtschaft damit eine deutlich reduzierte Abhängigkeit von Primärmetallen, welche fast ausschließlich außerhalb Europas erschlossen werden, erreichen.
Wiewohl die Forschung an HEAs bzw. allgemeiner MPEAs (Multi Principial Element Alloys) weltweit kontinuierlich intensiviert wird, gilt dies nicht für MPEAs, die vorrangig Leichtmetalle als verwenden und damit den Bereich niedriger Dichten (Rho < 6,0g/cm³) erschließen. Dies liegt vor allem an den komplexen atomaren Bindungszuständen von Leichtmetallen.
Für die zukünftige Mobilität ist die bewegte Masse der entscheidende Faktor für die erreichbare Energieeffizienz. Für die Umsetzung nachhaltiger Mobilitätsszenarien bedarf es metallischer Werkstoffe, die ihre spezifischen Limits weit über den heutigen Stand hinaus ausreizen, um die notwendigen Gewichts- und CO2-Einsparungen realisieren zu können.
Um im Bereich niedrig dichter MPEAs Fortschritte erzielen zu können und langfristig eine Vorhersagbarkeit solch komplexer Legierungen etablieren zu können, bedarf es intensiver

Forschungsanstrengungen an der Schnittstelle zwischen nano- (d.h. atomaren) und mikrokopischen (d.h. metallurgischen) Vorgängen. Das Projekt PL2N A vereint beide Skalen sowohl mittels simulativer als auch experimenteller Methoden:
Die kombinierte Verwendung von atomistischer ab-initio DFT-Simulation mit sog. Cluster Expansion (CE) und Monte Carlo-Simluation erschließt die Evolution von solchen Legierungen von der Interaktion einzelner Atome bis zum temperaturabhängigen Verhalten von massiven Metallen auf makroskopischer Ebene. Durch Sputtering von MPEADünnschichten, können Legierungsbibliothekens hergestellt werden und die tatsächliche Stabilität der Phasen untersucht werden. Der Abgleich dieser Ergebnisse mit denen der Simulationsmethoden erlaubt eine Weiterentwicklung bestehender Modelle in den Bereich niedrig dichter MPEAs.

Abstract

Within the last decade, the novel concept of so-called High Entropy Alloys (HEAs), usually consisting of 4 and more elements at almost equimolar ratios, has delivered an astonishing number of high performance metal alloys. These alloys outperform the current state of art in conventional alloys like steel, by absolute values of strength and ductility, and, beyond, are better capable of approaching their theoretical limit. While commercial alloys usually face boundaries at appro. 10% of their theoretical value, some MPEAs could already establish up to 25%.
At the same time, recent research results indicate that MPEAs could increase the pollution tolerance by one order of magnitude as compared to modern alloys. By that, EOL scrap could be re-valorized as a full equivalent to primary sources, which are almost exclusively located outside of Europe and in particular outside of Austria. The dependency on foreign primary producers and energy consumption of metal production could hence be massively decreased.
While there is an increasing research effort in MPEAs (Multi Principal Element Alloys) worldwide, investigations into low density MPEAs (unravelling the density range < 6,0g/cm³) using predominantly light metals as basis is basically non-existent. This can be traced back, to a large amount, to the increased complexity of atomic binding conditions of light metals
For future mobility applications, the absolute vehicle mass is the crucial factor for maximizing the energy effiency potential. In order to establish sustainable scenarios of future transportation, metal materials are required that can outbid their theoretical limits way beyond the current state of art, if the international reduction goals in CO2 are to be reached.
In order to progress knowledge in low density MPEAs and establish a distinct level of predictability of such alloys, intense research efforts at the boundary of nano- and microscale is necessary. PL2N A merges both scales using sophisticated numerical and experimental methods.
The combinatorial exploitation of ab-inito DFT simulation together with Cluster Expansion (CE) and Monte Carlos simulation unveils the thermodynamic evolution of low density MPEAs based on single atom interactions. By using sputtering technique, alloy libraries can

be produced and actual phase stabilities can be compared to simulation, allowing establishing enhanced or novel models to predict low density MPEAs.

Projektkoordinator

- LKR Leichtmetallkompetenzzentrum Ranshofen GmbH

Projektpartner

- Technische Universität Hamburg-Harburg - Institut für keramische Hochleistungswerkstoffe
- Technische Universität Wien Institut für Festkörperphysik
- Technische Universität Wien Universitäre Service-Einrichtung für Transmissions-Elektronenmikroskopie (USTEM)