

Cobalt-Rhenium-Legierungen

Untersuchung von Cobalt-Rhenium-Legierungen mit der Dichtefunktionaltheorie

M. Bäker, Institut für Werkstoffe, Technische Universität Braunschweig

Kurzgefasst

- Atomistische Simulation von Cobalt-Rhenium-Legierungen
- Vorhersage der Gitterstruktur
- Berechnung der Stapelfehlerenergie
- Bestimmung des Einflusses von Legierungselementen

Cobalt-Rhenium-Legierungen sind eine vielversprechende Legierungsklasse für Hochtemperaturanwendungen im Bereich jenseits von 1400 K, die am Institut für Werkstoffe der TU Braunschweig entwickelt und erforscht wird [1,2]. Rhenium und Cobalt sind zwei Elemente, die sich beliebig mischen lassen, wobei Rhenium durch seinen hohen Schmelzpunkt den Schmelzpunkt der Legierung erhöht.

Für den Einsatz bei hohen Temperaturen ist eine hinreichend hohe Festigkeit erforderlich. Diese lässt sich erreichen, wenn Tantal und Kohlenstoff zugefügt werden, die verfestigende Tantal-Karbide bilden, die auch bei hohen Temperaturen stabil sind.

Ein Problem bei diesem Verfestigungsmechanismus besteht darin, dass Tantal und Kohlenstoff nur dann eine hohe Löslichkeit besitzen, wenn die Legierung in der kubisch flächenzentrierten Phase vorliegt. Cobalt zählt zu den allotropen Materialien, die abhängig von der Temperatur eine Phasenumwandlung durchmachen: Bei niedrigen Temperaturen ist die Gitterstruktur hexagonal, bei hohen Temperaturen kubisch. Die Legierungselemente Rhenium und Chrom, das zugefügt wird, um die Oxidationsbeständigkeit zu erhöhen, stabilisieren die hexagonale Phase auch bei hohen Temperaturen.

Eine Cobalt-Rhenium-Legierung, die mit Tantal-karbid verfestigt wird, sollte deshalb bei Betriebstemperatur in der hexagonalen Phase vorliegen, sollte aber oberhalb dieser Temperatur in die kubische Phase umwandeln. Damit ergibt sich ein relativ enger Temperaturbereich, in dem die Phasenumwandlung stattfinden muss. Um Cobalt-Rhenium-Legierungen zu optimieren, ist es deshalb wichtig, zu verstehen, wie Legierungselemente die Stabilität der Phasen beeinflussen. In diesem Projekt soll dies mit Hilfe der Methode der Dichtefunktionaltheorie untersucht werden.

Dazu soll zunächst der stabilisierende Effekt von Cr und Re im Detail untersucht werden, wobei die Konzentration der Legierungselemente variiert wird. Zusätzlich sollen andere mögliche Legierungselemente auf ihre stabilisierende Wirkung hin analysiert werden.

Ein weiterer wichtiger Aspekt beim Legierungsdesign ist die Kriechbeständigkeit, also die Festigkeit bei lange einwirkender Last bei hohen Temperaturen. Diese wird unter anderem durch die Energie von Gitterbaufehlern, so genannten Stapelfehlern, bestimmt. Deshalb soll auch die Stapelfehlerenergie in diesem Projekt abhängig von der Legierungszusammensetzung untersucht werden.

Eine andere Möglichkeit der Verfestigung ist das Einbringen von Fremdatomen, die Mischkristallverfestigung. Deshalb sollen innerhalb des Projekts mögliche Legierungselemente auf ihren Einfluss auf die Phasenstabilität und auf eine mögliche Wirkung als Mischkristallverfestiger untersucht werden.

Im vorliegenden Neuantrag soll zunächst über einen Zeitraum von zwei Quartalen die grundlegende Methodik etabliert und untersucht werden, wie aufwändig die Berechnungen genau sind, da mit dem Legierungssystem Co-Re-Cr bisher wenig Erfahrungen vorliegen. Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen wird dann ein entsprechender Fortsetzungsantrag eingereicht.

WWW

<https://www.tu-braunschweig.de/ifw>

Weitere Informationen

- [1] RÖSLER, J. ; MUKHERJI, D. ; BARANSKI, T.: Co-Re-based Alloys: A New Class of High Temperature Materials? In: *Advanced Engineering Materials* 9 (2007), Oct, Nr. 10, 876–881.
- [2] MUKHERJI, Debashis ; RÖSLER, Joachim ; WEHRS, Juri ; STRUNZ, Pavel ; BERAN, Přemysl ; GILLES, Ralph ; HOFMANN, Michael ; HOELZEL, Markus ; ECKERLEBE, Helmut ; SZENTMIKLÓSI, Laszlo ; MÁCSIK, Zsuzsanna: Application of In Situ Neutron and X-Ray Measurements at High Temperatures in the Development of Co-Re-Based Alloys for Gas Turbines. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 44 (2012), Aug, Nr. 1, 22–30.

DFG Fachgebiet

406-03

