



پژوهش‌نامه ریخته‌گری

مقاله پژوهشی:

طراحی آلیاژهای دیرگداز آنتروپی بالا با هدف کاهش وزن و هزینه

حامد ناصر زشکی^۱، علیرضا کیانی رشید^{۲*}، جلیل وحدتی خاکی^۲

۱- دانشجوی دکتری، گروه مهندسی متالورژی و مواد، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، ایران

۲- استاد، گروه مهندسی متالورژی و مواد، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، ایران

* نویسنده مکاتبه کننده: تلفن: ۰۵۱-۳۸۸۱۷۱۸۲، مشهد، میدان آزادی، دانشگاه فردوسی مشهد، Email: kianirashid@um.ac.ir

چکیده:

دریافت: ۱۳۹۹/۰۵/۲۶

پذیرش: ۱۳۹۹/۰۷/۲۰

آلیاژهای آنتروپی بالا دسته جدیدی از آلیاژهای چند جزئی هستند که فاز محلول جامد به عنوان فاز اصلی در آنها تشکیل می‌شود. این آلیاژها به دلیل تنوع عناصر اصلی در ترکیب شان، ظرفیت بسیار مناسبی جهت طراحی آلیاژهایی با خواص مورد نظر از جمله وزن کمتر و هزینه کمتر را دارند. در سال‌های اخیر فعالیت‌های متعددی در زمینه آلیاژهای دیرگداز آنتروپی بالا جهت کاربردهای دما بالا انجام شده است. با این حال از آنجایی که فلزات دیرگداز عموماً دارای چگالی بسیار بالا و تا حدودی گران قیمت است، لذا طراحی ترکیب آلیاژ به نحوی که بتوان وزن و هزینه مواد اولیه را کاهش داد، اهمیت ویژه‌ای دارد. در این پژوهش با استفاده از محاسبات پارامترهای ترمودینامیکی و فیزیکی ترکیب عناصر در آلیاژهای دیرگداز آنتروپی بالا W-Mo-Ta-Nb-V و W-Mo-Cr-Ti-Al به نحوی بهینه سازی شد که ضمن رسیدن به فاز محلول جامد، وزن و هزینه به حداقل برسد. نهایتاً آلیاژ دیرگداز آنتروپی بالا $W_{10}Mo_{27}Cr_{21}Ti_{22}Al_{20}$ به عنوان آلیاژ با ترکیب بهینه در سیستم آلیاژی W-Mo-Cr-Ti-Al انتخاب و به روش ذوب قوسی در خلاء ذوب و آلیاژسازی شد. این آلیاژ حاوی فاز محلول جامد با ساختار BCC به عنوان فاز اصلی و مقدار کمی فاز لوله به عنوان فاز فرعی است که توافق خوبی با نتایج محاسباتی دارد. تصویر SEM-BSE آلیاژ ریخته‌گری یک ریزساختار دندریتی را نشان می‌دهد که دندریت‌ها غنی از عناصر با نقطه ذوب بالاتر همچون تنگستن و مولیبدن و بین دندریت‌ها غنی از آلومینیوم، تیتانیوم و کروم است.

واژه‌های کلیدی:

آلیاژهای آنتروپی بالا،

وزن،

هزینه،

محلول جامد،

ریزساختار دندریتی.

ارجاع به این مقاله:

حامد ناصر زشکی، علیرضا کیانی رشید، جلیل وحدتی خاکی، طراحی آلیاژهای دیرگداز آنتروپی بالا با هدف کاهش وزن و هزینه، پژوهش‌نامه ریخته‌گری، پاییز ۱۳۹۹، جلد ۴، شماره ۳، صفحات ۱۶۷-۱۷۳.

شناسه دیجیتال: (DOI): 10.22034/frj.2020.244014.1124

۱- مقدمه

بوده است. برخی از ویژگی‌های آلیاژهای آنتروپی بالا در مقایسه با آلیاژهای معمول عبارتند از: سختی و استحکام بالا، مقاومت به خوردگی و مقاومت به اکسیداسیون خوب، پایداری دما بالا و استحکام دما بالای عالی. این ویژگی‌ها باعث توجه خاص به این دسته از آلیاژها جهت کاربرد در دماهای بالا شده است [۴-۸]. یکی از محدودیت‌های اصلی در طراحی آلیاژهای آنتروپی بالا، داشتن آنتروپی اختلاط حداکثر جهت رسیدن به محلول جامد تک فازی است. از آنجایی که برای رسیدن به آنتروپی اختلاط حداکثر باید عناصر اصلی آلیاژ دارای نسبت‌های اتمی برابر و یا تقریباً برابر باشند لذا آلیاژهای آنتروپی بالا تنها به آلیاژهایی با نسبت‌های اتمی برابر یا تقریباً برابر از عناصر تشکیل دهنده

یکی از اهداف اصلی در طراحی آلیاژها، کاهش هزینه و وزن نهایی آلیاژ با حفظ نسبی سایر خواص است. در آلیاژهای چند جزئی به دلیل تنوع بیشتر در نوع و مقدار عناصر آلیاژی، زمینه بسیار مساعدی برای طراحی بهینه آلیاژ جهت رسیدن به خواص مورد نظر از جمله وزن و یا هزینه مواد اولیه کمتر وجود دارد [۱-۳]. آلیاژهای آنتروپی بالا دسته جدیدی از آلیاژهای چند جزئی می‌باشند که درصد اتمی عناصر اصلی آن بین ۵ تا ۳۵ درصد متغیر است. این آلیاژها به دلیل امکان تشکیل محلول جامد بین عناصر تشکیل دهنده، عمدتاً خواص بهتری نسبت به آلیاژهای معمول دارند و لذا در سالهای اخیر بسیار مورد توجه پژوهشگران

$$\Omega = \frac{T_m \Delta S_{mix}}{|\Delta H_{mix}|} \quad (1)$$

$$\delta = 100 \times \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2} \quad (2)$$

در این روابط T_m ، ΔS_{mix} و ΔH_{mix} به ترتیب دمای ذوب متوسط آلیاژ، آنتروپی اختلاط و آنتالپی اختلاط می‌باشند که مطابق روابط (۳) الی (۵) محاسبه می‌شوند. r_i و \bar{r} نیز به ترتیب شعاع اتمی عنصر i ام و شعاع متوسط آلیاژ است.

$$T_m = \sum X_i T_{m_i} \quad (3)$$

$$\Delta S_{mix} = -R \sum_{i=1}^N x_i \ln x_i \quad (4)$$

$$\Delta H_{mix} = \sum_{i=1, i \neq j}^N 4\Delta H_{ij}^{mix} x_i x_j \quad (5)$$

به طور تجربی مشخص شده است که برای تشکیل محلول جامد در آلیاژهای آنتروپی بالا، باید مقدار پارامتر Ω بیشتر از ۱/۱ و مقدار اختلاف اندازه اتمی کمتر از ۶/۶٪ باشد. ترکیب بهینه آلیاژ بر این اساس انتخاب می‌شود که آلیاژ موردنظر علاوه بر تشکیل فاز محلول جامد، دارای وزن و قیمت مواد اولیه حداقل باشد. چگالی آلیاژ (ρ) نیز با استفاده از رابطه (۶) بدست می‌آید. در این رابطه ρ_i ، A_i ، x_i به ترتیب کسر مولی، جرم مولی، چگالی عنصر i ام و چگالی آلیاژ است [۲۲-۲۴].

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n x_i A_i}{\sum_{i=1}^n \frac{x_i A_i}{\rho_i}} \quad (6)$$

هزینه مواد اولیه نیز مطابق رابطه (۷) به ازای هر گرم آلیاژ در واحد قابل محاسبه است. که در این رابطه $w_t\%_i$ و C_i به ترتیب درصد وزنی عنصر i و هزینه هر گرم عنصر i است.

$$C = \frac{\sum_{i=1}^n w_t\%_i \times C_i}{100} \quad (7)$$

برای انتخاب آلیاژهای بهینه در سیستم‌های آلیاژی W-Mo-Ta-Nb-V و W-Mo-Ta-Nb-V پارامترهای تجربی Ω ، δ و ρ برای درصدهای مختلف آلیاژهای ذکر شده (در محدوده ۵ تا ۳۵ درصد اتمی برای هر عنصر) با استفاده از نرم‌افزار محاسباتی متلب محاسبه شده و شرایط تشکیل محلول جامد ($\Omega \leq 1/1$ و $\delta \leq 6/6$) اعمال گردید. در ادامه تغییرات پارامترهای وزن و هزینه با ترکیب محاسبه شده و آلیاژهای بهینه انتخاب شدند. برخی از خواص عناصر مورد استفاده در این سیستم‌های آلیاژی در جدول (۱) گزارش شده است [۲۵-۲۸]. جهت

محدود می‌شود [۹-۱۲]. با این حال با وارد کردن سایر پارامترهای ترمودینامیکی موثر بر پایداری فاز محلول جامد می‌توان فاز محلول جامد را در ترکیب‌های غیر هم اتمی نیز بدست آورد [۱۳-۱۵].

در زمینه استفاده از آلیاژهای آنتروپی بالا در دماهای بالا، برای اولین بار در سال ۲۰۱۰ آلیاژ دیرگداز آنتروپی بالا $W_{20}Mo_{20}Ta_{20}Nb_{20}V_{20}$ و $W_{25}Mo_{25}Ta_{25}Nb_{25}$ معرفی شد [۱۶، ۱۷]. این آلیاژها اگرچه استحکام و سختی بالایی در دماهای بالا از خود نشان می‌دهند، با این حال به دلیل مشکلاتی همچون: الف) چگالی بالا ($13/75 \text{ g/cm}^3$ و $12/35 \text{ g/cm}^3$ به ترتیب) و ب) مقاومت به اکسیداسیون ضعیف در دماهای بالا، در سال‌های اخیر فعالیت‌های پژوهشی متعددی جهت بهبود و کاهش مشکلات این دسته از آلیاژها صورت گرفته است. جایگزینی عناصر سبک‌تر و با مقاومت به اکسیداسیون بالاتر همچون آلومینیم، کروم و تیتانیوم با برخی از عناصر این آلیاژها از جمله این فعالیت‌ها است [۱۸-۲۱].

در این پژوهش، با استفاده از روابط ترمودینامیکی و بهینه‌سازی ترکیب آلیاژ، سعی شده است ضمن فراهم شدن شرایط تشکیل فاز محلول جامد، بر محدودیت طراحی آلیاژهای آنتروپی بالا که همان نسبت‌های اتمی برابر در این دسته از آلیاژها است غلبه شود. از این رو هدف اصلی پژوهش حاضر، کم کردن نسبت عناصر گران‌تر و یا سنگین‌تر (با حفظ شرایط تشکیل فاز محلول جامد) و تهیه دسته جدیدی از آلیاژهای آنتروپی بالا با هزینه کمتر می‌باشد که می‌تواند گام مهمی در طراحی بهینه آلیاژهای آنتروپی بالا باشد. برای این منظور آلیاژهای با نسبت‌های اتمی غیر یکسان در سیستم‌های آلیاژی W-Mo-Ta-Nb-V و W-Mo-Ta-Nb-V-Mo-Cr-Ti-Al مورد بررسی قرار گرفت و آلیاژهای بهینه در این دو سیستم بدست آمد. در ادامه آلیاژ بهینه در سیستم آلیاژی W-Mo-Ta-Nb-V-Mo-Cr-Ti-Al به روش ذوب قوسی در خلاء سنتز و ارزیابی شد.

۲- روش تحقیق

۲-۱- طراحی آلیاژ

بر اساس مبانی ترمودینامیکی و قوانین هیوم روتاری، پیش‌بینی تشکیل فاز محلول جامد در آلیاژهای چند جزئی را می‌توان با استفاده از یکسری پارامترهای ترمودینامیکی و فیزیکی بیان نمود. پارامتر Ω که بیان‌کننده نسبت آنتروپی اختلاط به آنتالپی اختلاط است و همچنین پارامتر δ که نشان‌دهنده اعوجاج شبکه ناشی از اختلاف اندازه‌های اتمی است، مهمترین پارامترها جهت پیش‌بینی تشکیل فاز محلول جامد معرفی شده‌اند [۹، ۱۰].

گرفت. الگوهای بدست آمده نیز توسط نرم افزار PANalytical X'Pert High Score شناسایی و همزمان با کارت‌های استاندارد JCPDS موجود در بانک اطلاعاتی نرم‌افزار مقایسه شد. از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM, LEO1450VP) مجهز به آشکارسازهای الکترون برگشتی و طیف سنج تفکیک انرژی اشعه ایکس نیز جهت بررسی ریزساختار و آنالیز عنصری نمونه‌ها استفاده شد.

۳- نتایج و بحث

جهت انتخاب آلیاژهای بهینه، پس از اعمال شرایط تشکیل محلول جامد، تغییرات پارامترهای چگالی و هزینه با ترکیب محاسبه و آلیاژ بهینه با حداقل چگالی و هزینه در هر دو سیستم آلیاژی بدست آمد. نتیجه محاسبات نشان داد آلیاژ $W_{16}Mo_{32}Ta_8Nb_{26}V_{18}$ به عنوان آلیاژ بهینه در سیستم W-Mo-Ta-Nb-V و آلیاژ $W_{10}Mo_{27}Cr_{21}Ti_{22}Al_{20}$ به عنوان آلیاژ بهینه در سیستم W-Mo-Cr-Ti-Al می‌باشد.

جدول (۳) مقدار پارامترهای محاسبه شده در آلیاژهای طراحی شده را در مقایسه با آلیاژ با نسبت اتمی برابر نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است با بهینه‌سازی ترکیب، ضمن برقراری شرایط تشکیل فاز محلول جامد، می‌توان به طور همزمان هم وزن و هم قیمت آلیاژ را کاهش داد. در سیستم آلیاژی W-Mo-Ta-Nb-V (سیستم آلیاژی ۱)، چگالی و قیمت در آلیاژ با ترکیب بهینه (OP1) به ترتیب حدود ۱۱ و ۲۲ درصد نسبت به آلیاژ با نسبت اتمی برابر (EQ1) کاهش یافته است. در سیستم آلیاژی W-Mo-Cr-Ti-Al (سیستم آلیاژی ۲) نیز آلیاژ با ترکیب بهینه (OP2) دارای چگالی و قیمت به ترتیب حدود ۱۳ و ۱۰ درصد کمتر از آلیاژ با نسبت اتمی برابر است. از طرف دیگر، سیستم آلیاژی ۲ به مراتب دارای چگالی و قیمت کمتری است و لذا آلیاژ بهینه در سیستم آلیاژی ۲ به عنوان آلیاژ بهینه نهایی انتخاب و مورد ارزیابی قرار گرفت.



شکل ۱- نمونه تهیه شده به روش ذوب قوسی در خلاء.

مقایسه، پارامترهای محاسبه شده برای برخی از ترکیبات بررسی شده در سیستم آلیاژی W-Mo-Cr-Ti-Al در جدول (۲) گزارش شده است.

جدول ۱- مشخصات و قیمت فلزات در آلیاژهای بررسی شده [۲۵-۲۸].

ویژگی عناصر	چگالی g/cm ³	دمای ذوب (°C)	شعاع اتمی (Å)	ساختار بلوری	قیمت - کیلوگرم (EUR)
تنگستن (W)	۱۹/۳	۳۴۲۲	۱/۴۶۷	BCC	۳۸۰
مولیبدن (Mo)	۱۰/۲	۲۶۲۳	۱/۳۶۲	BCC	۲۴۰
تانتالیم (Ta)	۱۶/۶	۳۰۱۰	۱/۴۳۰	BCC	۲۸۰۰
نیوبیم (Nb)	۸/۶	۲۴۷۷	۱/۴۲۹	BCC	۲۰۰۰
وانادیم (V)	۶/۱۱	۱۹۱۰	۱/۳۱۶	BCC	۴۷۰۰
کروم (Cr)	۷/۲	۱۹۰۷	۱/۲۴۹	BCC	۱۶۰
تیتانیوم (Ti)	۴/۵	۱۶۶۸	۱/۴۶۲	HCP/ BCC	۳۸۰
آلومینیم (Al)	۲/۷	۶۶۰	۱/۴۳۲	FCC	۸۰

۲-۲- سنتز و مشخصه‌یابی

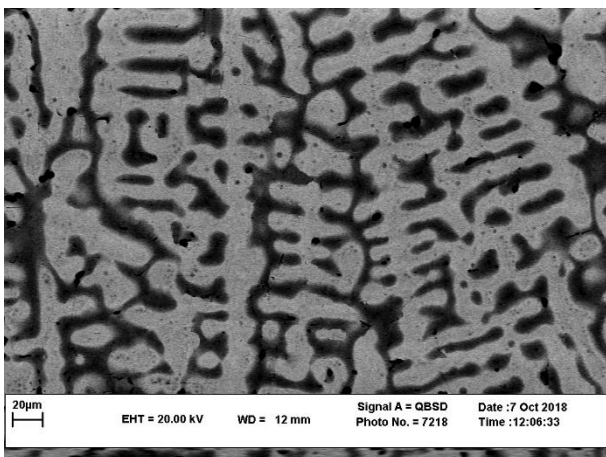
در پژوهش حاضر، پودرهای تنگستن، مولیبدن، کروم و آلومینیم با خلوص بالاتر از ۹۹/۵ درصد و پودر تیتانیوم با خلوص بالاتر از ۹۹ درصد به عنوان مواد اولیه استفاده شدند. پودرهای مواد اولیه پس از اختلاط، به صورت قرص‌هایی پرس شده و در بوتله‌ای از آلیاژ مس-برلیم با سیستم آبگرد به روش VAR ذوب و ریخته‌گری شدند. شایان ذکر است که در این روش الکتروود قوس تنگستنی استفاده شده و محفظه ذوب تحت خلاء 10^{-3} تور قرار داشت. با توجه به اختلاف دمای ذوب عناصر ترکیب، جهت ذوب و آلیاژسازی، ابتدا یک آمیزان از مذاب مخلوط آلومینیم، تیتانیوم و کروم ایجاد شده و سپس این آمیزان به مخلوط مذاب مولیبدن و تنگستن اضافه شد. به منظور رسیدن به توزیع همگن عناصر در آلیاژ، هر آلیاژ پنج مرتبه ذوب مجدد شده و در نهایت نمونه پولکی شکل با وزن تقریبی ۲۲ گرم مطابق شکل (۱) بدست آمد. بررسی فازها و ساختار بلوری با استفاده از آزمون پراش اشعه X (XRD, EXPLORER GNR) با اشعه Cu-K α و در گستره $2\theta = 20^\circ - 90^\circ$ با گام 0.01° و سرعت یک درجه بر ثانیه انجام

جدول ۲- پارامترهای محاسبه شده برای برخی از ترکیبات بررسی شده در سیستم آلیاژی W-Mo-Cr-Ti-Al

پارامترهای محاسبه شده					ترکیب (درصد وزنی)					
چگالی (g/cm ³)	دمای ذوب (°C)	δ (%)	Ω	ΔH _{mix} (kJ/mol)	Al	Ti	Cr	Mo	W	
۷/۹	۱۹۰۰	۵/۷	۲/۱	-۱۱/۹	۲۴	۲۱	۲۳	۱۶	۱۶	ترکیب ۱
۸/۱	۱۹۲۵	۵/۸	۲/۴	-۱۰/۴	۲۴	۱۶	۲۷	۱۶	۱۷	ترکیب ۲
۸/۳	۱۹۵۰	۵/۶	۲/۶	-۹/۹	۲۴	۱۵	۲۵	۱۹	۱۷	ترکیب ۳
۸/۴	۱۹۷۲	۵/۳	۲/۳	-۱۱/۲	۲۴	۲۰	۱۹	۱۷	۲۰	ترکیب ۴
۸/۷	۱۹۹۸	۵/۷	۳	-۸/۷	۲۳	۱۲	۲۸	۱۷	۲۰	ترکیب ۵
۹	۲۰۵۲	۵/۴	۳/۵	-۷/۶	۲۲	۱۰	۲۶	۲۲	۲۰	ترکیب ۶
۹/۳	۲۱۰۳	۵	۴/۴	-۵/۸	۲۳	۵	۲۳	۲۹	۲۰	ترکیب ۷
۸/۷	۲۰۴۲	۵/۳	۳/۱	-۱۰/۱	۲۰	۲۰	۲۰	۲۰	۲۰	ترکیب هم اتمی
۷/۶	۱۹۴۷	۵/۴	۲/۶	-۱۰/۹	۲۰	۲۲	۲۱	۲۷	۱۰	ترکیب بهینه

جدول ۳- مقادیر محاسبه شده چگالی، قیمت، دمای ذوب، پارامتر Ω و δ در آلیاژهای طراحی شده و آلیاژ با نسبت اتمی برابر.

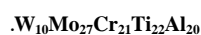
دمای ذوب (°C)	δ (%)	Ω	ΔH _{mix} (kJ/mol)	قیمت (1kg, EUR)	چگالی (g/cm ³)	کد	ترکیب آلیاژ
۲۳۷۰	۳/۸	۷/۴	-۴/۵	۱۵۲۷	۱۰/۹	OP1	W16Mo32Ta8Nb26V18
۲۵۲۴	۳/۷	۸/۱	-۴/۶	۱۹۶۰	۱۲/۳	EQ1	W20Mo20Ta20Nb20V20
۱۹۴۷	۵/۴	۲/۶	-۱۰/۹	۲۷۰	۷/۶	OP2	W10Mo27Cr21Ti22Al20
۲۰۴۲	۵/۳	۳/۱	-۱۰/۱	۲۹۷	۸/۷	EQ2	W20Mo20Cr20Ti20Al20



شکل ۲- تصویر SEM با مد BSE از ریزساختار ریختگی آلیاژ بهینه



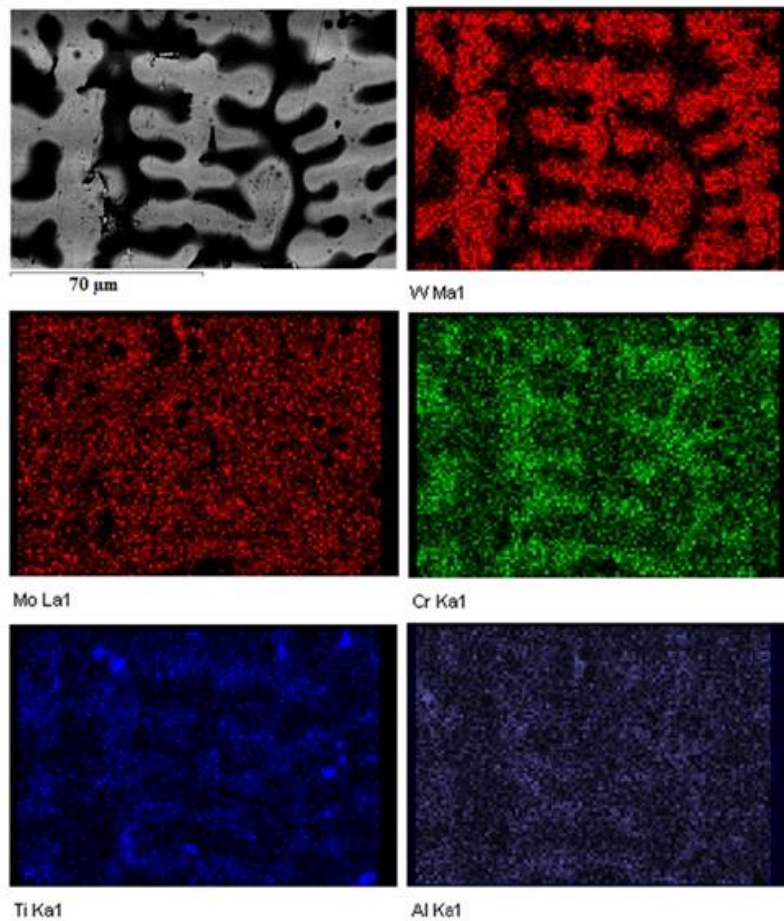
جدول ۴- ترکیب شیمیایی (%At) داخل دندریت و بین دندریت در آلیاژ



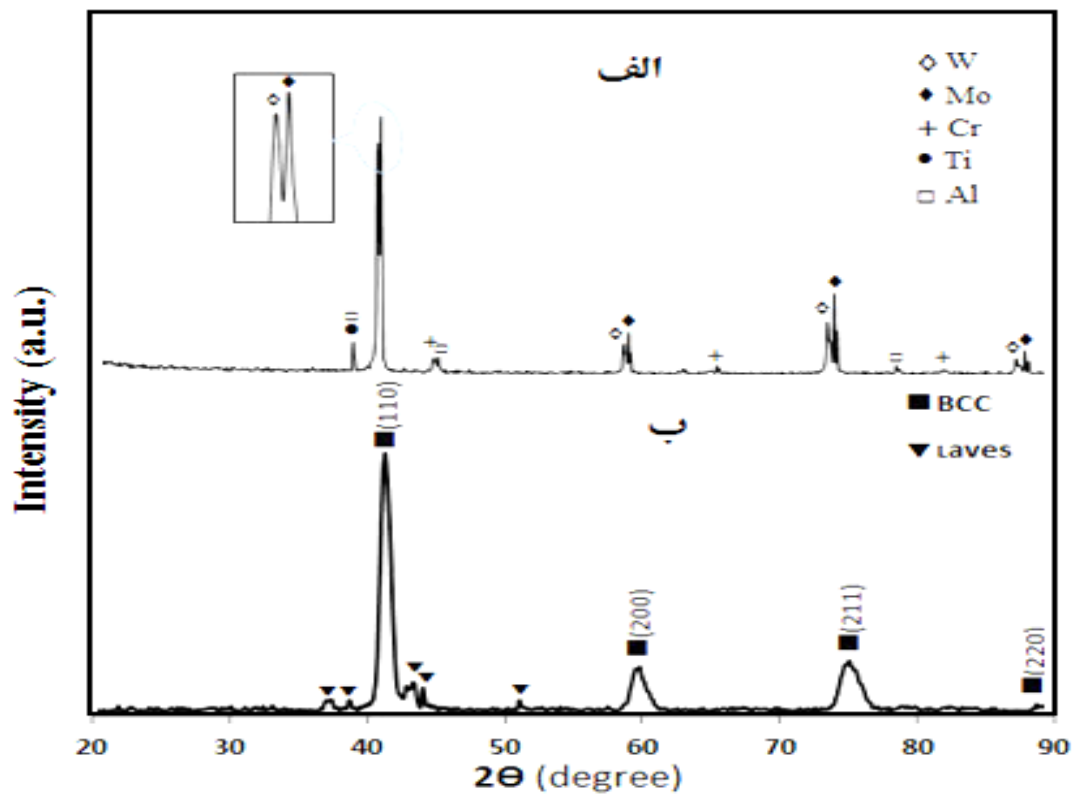
Al	Ti	Cr	Mo	W	عنصر
۲۰	۲۲	۲۱	۲۷	۱۰	ترکیب آلیاژ
۹/۴۱	۱۰/۳۳	۱۱/۶۴	۳۹/۸۴	۲۸/۷۸	داخل دندریت
۲۴/۳۱	۲۴/۴۲	۲۵/۱۸	۲۰/۶۱	۵/۴۸	بین دندریت

ریزساختار ریختگی این آلیاژ با استفاده از SEM با الکترون‌های برگشتی در شکل (۲) نشان داده شده است. ریزساختاری دندریتی در این آلیاژ به روشنی مشخص است. نواحی ریز مشکی رنگ مربوط به تخلخل‌های ریختگی است که حدود ۱/۸ درصد حجمی ریزساختار را شامل شده است. برای تعیین مقدار و نحوه توزیع عناصر در داخل و بین دندریت‌ها، نقشه توزیع عناصر از بخشی از ریزساختار این نمونه تهیه شد.

شکل (۳) تصویر SEM و نقشه توزیع عناصر مربوط به آن نشان می‌دهد. به دلیل تنوع عناصر با دمای ذوب متفاوت در ترکیب آلیاژ، ریزساختار دندریتی مشاهده می‌شود که درون دندریت‌ها غنی از عناصر با نقطه ذوب بیشتر به ویژه تنگستن و بین دندریت‌ها غنی از عناصر با نقطه ذوب کمتر (عمدتاً کروم، تیتانیوم و آلومینیوم) است. مولیدن نیز توزیع نسبتاً یکنواختی را در ریزساختار از خود نشان می‌دهد. ترکیب شیمیایی داخل دندریت و بین دندریتی با استفاده از آنالیز نقطه‌ای EDS در جدول (۴) گزارش شده است.



شکل ۳- تصویر SEM و نقشه توزیع عناصر مربوط به آن در آلیاژ ریخته‌گی $W_{10}Mo_{27}Cr_{21}Ti_{22}Al_{20}$.



شکل ۴- الگوی‌های XRD: الف) مخلوط پودرهای عناصر در آلیاژ $W_{10}Mo_{27}Cr_{21}Ti_{22}Al_{20}$ و ب) پس از ذوب به روش VAR.

- [3] Feng R., Gao M.C., Lee C., Mathes M., Zuo T., Chen S., Hawk J.A., Zhang Y., Liaw P.K., Design of light-weight high-entropy alloys, *Entropy*, 2016, 18(9) 333.
- [4] Gao M.C., Yeh J.W., Liaw P.K., Zhang Y., High-Entropy Alloys Fundamentals and Applications, Springer, 2016.
- [5] Tsai M.H., Yeh J.W., High-entropy alloys: A critical review, *Materials Research Letters*, 2014, 2, 107-123.
- [6] Abbasi E., Dehghani K., Phase prediction and microstructure of centrifugally cast non-equiatom Co-Cr-Fe-Mn-Ni (Nb,C) high entropy alloys, *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 783, 292-299.
- [7] Chen J., Zhou X., Wang W., Liu B., Lv Y., Yang W., Xu D., L. Yong, A review on fundamental of high entropy alloys with promising high-temperature properties, *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 760, 15-30.
- [8] Senkov O.N., Miracle D.B., Chaput K.J., Couzinie J.P., Development and exploration of refractory high entropy alloys- A review, *Journal of Materials Research and Technology*, 2018, 33(19) 3092-3128.
- [9] Yang X., Zhang Y., Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys, *Materials Chemistry and Physics*, 2012, 132, 233-238.
- [10] King D.J.M., Middleburgh S.C., McGregor A.G., Cortie M.B., Predicting the formation and stability of single phase high-entropy alloys, *Acta Materiali*, 2016, 104, 172-179.
- [11] Cai Z., Jin G., Cui X., Li Y., Fan Y., Song J., Experimental and simulated data about microstructure and phase composition of a NiCrCoTiV high-entropy alloy prepared by vacuum hot-pressing sintering, *Vacuum*, 2016, 124, 5-10.
- [12] Huang M., Wang C., Cui H., Zhang W., Zhang C., Investigation of the structure and properties of AlCrCuFeNiVx high-entropy alloys, *Vacuum*, 2020, 173, 109-129.
- [13] Nagase T., Todai M., Hori T., Nakano T., Microstructure of equiatom and non-equiatom Ti-Nb-Ta-Zr-Mo high-entropy alloys for metallic biomaterials, *Journal of Alloys and Compound*, 2018, 753, 412-421.
- [14] Li Z., Raabe D., Strong and ductile non-equiatom high-entropy alloys: design, processing, microstructure, and mechanical properties, *Journal of the Minerals Metals and Materials Society*, 2017, 69, 2099-2106.
- [15] Pradeep K.G., Tasan C.C., Yao M.J., Deng Y., Springer H., Raabe D., Non-equiatom high entropy alloys: Approach towards rapid alloy screening and property-oriented design, *Materials Science and Engineering: A*, 2015, 648, 183-192.
- [16] Senkov O.N., Wilks G.B., Miracle D.B., Chuang C.P., Liaw P.K., Refractory high-entropy alloys, *Intermetallics*, 2010, 18, 1758-1765.
- [17] Senkov O.N., Wilks G.B., Scott J.M., Miracle D.B., Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V_rNb_rMo_rTa_rW_r refractory high entropy alloys, *Intermetallics*, 2011, 19, 698-706.
- [18] Gorr B., Azim M., Christ H.J., Mueller T., Schliephake D., Heilmaier M., Phase equilibria, microstructure, and high temperature oxidation resistance of novel refractory high-entropy alloys, *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 624, 270-278.
- [19] Yang X., Zhang Y., Liaw P.K., Microstructure and Compressive Properties of NbTiVTaAl_x High Entropy Alloys, *Procedia Engineering*, 2012, 36, 292-298.
- [20] Lilensten L., Couzinie J.P., Perrière L., Bourgon J., Emery N., Guillot I., New structure in refractory high-entropy alloys, *Materials Letters*, 2014, 132, 123-125.
- [21] Wu Y., Si J., Lin D., Wang T., Wang W. Y., Wang Y., Liu Z., Hui X., Phase stability and mechanical properties of AlHfNbTiZr high-entropy alloys, *Materials Science and Engineering: A*, 2018, 724, 249-259.

شکل (۴) الگوهای XRD آلیاژ بهینه W₁₀Mo₂₇Cr₂₁Ti₂₂Al₂₀ را در حالت مخلوط شده پیش از ذوب و پس از ذوب و ریخته‌گری به روش VAR نشان می‌دهد. در نمونه مخلوط شده، پیک‌های عناصر تشکیل دهنده آلیاژ به طور کاملاً مجزا به روشنی مشخص است. با این حال الگوی نمونه پس از ذوب و آلیاژسازی نشان می‌دهد که فاز محلول جامد با ساختار بلوری BCC و نزدیک به پیک‌های تنگستن به عنوان فاز اصلی تشکیل شده است. علاوه بر این مقدار بسیار کمی نیز فازهای لاهه با ترکیب Cr₂Ti به عنوان فاز فرعی مشاهده می‌شود. نتایج XRD در توافق خوبی با نتایج محاسباتی، تشکیل فاز محلول جامد را به عنوان فاز اصلی در این آلیاژ تایید می‌کند.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش طراحی بهینه آلیاژهای دیرگداز آنتروپی بالا، ذوب و ریخته‌گری آلیاژ بهینه نهایی و در نهایت بررسی فازی و ریزساختار آلیاژ مورد نظر بوده است. در ادامه نتایج این پژوهش به طور خلاصه بیان شده است:

۱- آلیاژ W₁₆Mo₃₂Ta₈Nb₂₆V₁₈ به عنوان ترکیب بهینه در سیستم آلیاژی W-Mo-Ta-Nb-V و آلیاژ W₁₀Mo₂₇Cr₂₁Ti₂₂Al₂₀ به عنوان ترکیب بهینه در سیستم W-Mo-Cr-Ti-Al معرفی شد.

۲- با حفظ شرایط تشکیل محلول جامد، وزن و هزینه آلیاژهای بهینه نسبت به آلیاژهای با نسبت اتمی برابر در سیستم آلیاژی ۱ به ترتیب حدود ۱۱ و ۲۲ و در سیستم آلیاژی ۲ حدود ۱۳ و ۱۰ درصد کاهش یافته است.

۳- آلیاژ آنتروپی بالای W₁₀Mo₂₇Cr₂₁Ti₂₂Al₂₀ با موفقیت به روش VAR سنتز و ارزیابی شد.

۴- الگوی XRD این آلیاژ تشکیل فاز محلول جامد با شبکه BCC را به عنوان فاز اصلی تایید می‌کند که در توافق با نتایج محاسباتی است.

۵- آلیاژ ریختگی دارای ریزساختار دندریتی است که درون دندریت‌ها غنی از تنگستن و بین دندریت‌ها غنی از عناصر با نقطه ذوب کمتر (آلومینیم، تیتانیوم و کروم) است. مولیبدن نیز توزیع یکنواختی در داخل و بین دندریت‌ها دارد.

مراجع

- [1] Senkov O.N., Miller J.D., Miracle D.B., Woodward C., Accelerated exploration of multi-principal element alloys with solid solution phases, *Nature Communications*, 2015, 6, 6529.
- [2] Ye Y.F., Wang Q., Lu J., Liu C.T., Yang Y., High-entropy alloy: challenges and prospects, *Materials Today*, 2016, 19(6) 349-362.

- [25] <http://periodictable.com/Properties>, (n.d.).
- [26] Senkov O.N., Woodward C.F., Microstructure and properties of a refractory NbCrMo_{۰.۵}Ta_{۰.۵}TiZr alloy, *Materials Science and Engineering: A*, 2011, 529, 311-320.
- [27] <https://www.sigmaldrich.com>, (n.d.).
- [28] Yao H.W., Qiao J.W., Gao M.C., Hawk J.A., Ma S.G., Zhou H.F., Zhang Y., NbTaV-(Ti,W) refractory high-entropy alloys: Experiments and modeling, *Materials Science and Engineering: A*, 2016, 674, 203-211.
- [22] Xiang C., Han E.H., Zhang Z.M., Fu H.M., Wang J.Q., Zhang H.F., Hu G.D., Design of single-phase high-entropy alloys composed of low thermal neutron absorption cross-section elements for nuclear power plant application, *Intermetallics*, 2019, 104, 143-153.
- [23] Yao H.W., Qiao J.W., Hawk J.A., Zhou H.F., Chen M.W., Gao M.C., Mechanical properties of refractory high-entropy alloys: Experiments and modeling, *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, 696, 1139-1150.
- [24] Senkov O.N., Jensen J.K., Pilchak A.L., Miracle D.B., Fraser H.L., Compositional variation effects on the microstructure and properties of a refractory high-entropy superalloy AlMo_{0.5}NbTa_{0.5}TiZr, *Materials and Design*, 2018, 139, 498-511.



IRANIAN FOUNDRYMEN'S
SOCIETY

Founding Research Journal

Research Paper:

Design of Refractory High-Entropy Alloys to Reduce Weight and Cost

Hamed Naser Zoshki¹, Ali-Reza Kiani Rashid^{2*}, Jalil Vahdati Khaki²

1. Ph.D. Student, Department of Metallurgical and Materials Engineering, Faculty of Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, IRAN

2. Professor, Department of Metallurgical and Materials Engineering, Faculty of Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, IRAN

* **Corresponding Author:** Mashhad, Ferdowsi University of Mashhad, Tel: +98 513 8817182, E-mail: kianirashid@um.ac.ir

Paper history:

Received: 16 August 2020

Accepted: 11 October 2020

Abstract

High entropy alloys (HEAs) are a new class of multicomponent alloys in which the solid solution phase is formed as the main phase. Due to the variety of elements in their composition, these alloys have a good capacity to design alloys with desired properties such as lower weight and lower cost. In recent years, several studies have been conducted on refractory high-entropy alloys (RHEAs) for high temperature applications. However, refractory metals are generally very high density and somewhat expensive, so it is important to design the composition of these alloys so that the weight and cost of raw materials can be reduced. In this study, using calculations of thermodynamic and physical parameters, the composition of elements in W-Mo-Ta-Nb-V and W-Mo-Cr-Ti-Al RHEAs were optimized so that while reaching the solid solution phase, weight and cost are minimized. Finally, W₁₀Mo_{0.27}Cr_{2.1}Ti_{2.2}Al_{2.0} RHEA was obtained as the alloy with optimal composition in W-Mo-Cr-Ti-Al system and then melted and casted by VAM method. This RHEA contains a solid solution phase with BCC structure as the main phase and a small amount of Laves phase as a minor phase, which has a good agreement with the calculation results. SEM-BSE image of the as-cast RHEA exhibits a typical dendritic microstructure that the dendrites are enriched with elements with higher melting points such as W and Mo and interdendrites are enriched with Cr, Ti and Al.

Keywords:

High entropy alloys,
Weight,
Cost,
Solid solution,
Dendritic microstructure.

Please cite this article using:

Hamed Naser Zoshki, Ali-Reza Kiani Rashid, Jalil Vahdati Khaki, Design of Refractory High-Entropy Alloys to Reduce Weight and Cost, in Persian, *Founding Research Journal*, 2020, 4(3) 167-173.

DOI: 10.22034/frj.2020.244014.1124

Journal homepage: www.foundingjournal.ir