

## Cobalt-Rhenium-Legierungen

### Simulation von Cobalt-Rhenium-Legierungen mit der Dichtefunktionaltheorie

*M. Bäker, Institut für Werkstoffe, Technische Universität Braunschweig*

#### Kurzgefasst

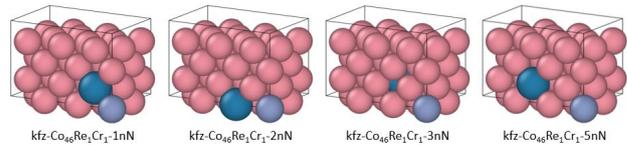
- Atomistische Simulation von Cobalt-Rhenium-Legierungen
- Vorhersage der Gitterstruktur
- Berechnung der Stapelfehlerenergie
- Bestimmung des Einflusses von Legierungselementen

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 Tantalcarbiden 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.



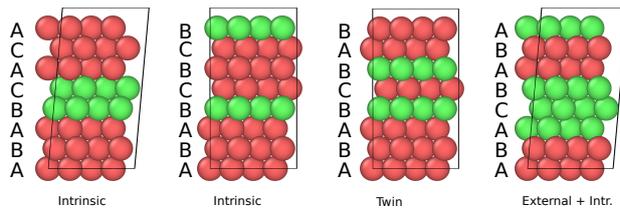
**Abbildung 1:** Verwendete Zellen zur Berechnung der Wechselwirkung zwischen Cr und Re in einem kubisch flächenzentrierten Gitter.

Im bisherigen Projektverlauf wurde die Wechselwirkung der Legierungselemente Cr und Re miteinander untersucht. Abb. 1 zeigt beispielhaft die Anordnung zweier Legierungsatome in einer kubisch flächenzentrierten Gitterstruktur. Es zeigte sich, dass Positionen, in denen zwei Legierungsatome auf über-nächsten Nachbarplätzen sitzen, energetisch besonders günstig sind. Cr hat die Tendenz, sein magnetisches Moment entgegengesetzt zu den Atomen der umliegenden Matrix auszurichten. Diese Tendenz ist in einer Co-Matrix deutlich stärker ausgeprägt als in einer Nickel-Matrix. In Nickel führt eine hinreichend große Konzentration an Cr-Atomen dazu, dass die Nickelatome nahezu kein magnetisches Moment mehr besitzen; zukünftige Untersuchungen sollen zeigen, ob dies auch für Cobalt gilt.

Weiterhin wurde bereits der Einfluss von Re auf die Phasenstabilität untersucht. Es zeigt sich, dass Re die hexagonal dicht gepackte Phase deutlich stabilisiert. Erste Ergebnisse für Cr zeigen ebenfalls einen stabilisierenden Effekt.

Im kommenden Antragszeitraum soll auch der stabilisierende Effekt weiterer Legierungselemente im Detail untersucht werden. Dazu wird zunächst die Wechselwirkung interessanter Legierungselemente mit Cr und Re untersucht, um zu sehen, wie diese von der Position im Kristallgitter und von der Gitterstruktur abhängt. Dies gibt bereits erste Aufschlüsse darüber, ob die Elemente auch bei hohen Cr- und Re-Konzentrationen dieselbe stabilisierende Wirkung besitzen wie in reinem Co.

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. Abb. 2 zeigt möliche Stapelfehler in einer hexagonalen Zelle mit 128 Atomen. Die ungeordnete Abfolge der Atome ist durch die Sequenz ABAB... gekennzeichnet; an Stapelfehlern ist diese Abfolge gestört. Die Stapelfehlerenergie soll in diesem Projekt abhängig von der Legierungszusammensetzung untersucht werden. Diese Rechnungen



**Abbildung 2:** Unterschiedliche Anordnungen von Stapelfehlern, bei denen die ideale hexagonale Gitterstruktur gestört ist.

erfordern eine hohe Rechenzeit, da die Energie des Stapelfehlers von seiner Lage relativ zu den Legierungsatomen abhängen wird. Es ist geplant, diesen Effekt systematisch zu untersuchen und möglichst eine Relation zwischen der Anzahl der Legierungselemente am Stapelfehler und dessen Energie herauszuarbeiten. Bisher wurde die Energie solcher Stapelfehler für reines Co berechnet, um eine Bezugsgröße zu haben. Im kommenden Projektzeitraum wird dann untersucht, welchen Einfluss Cr und Re auf diese Energie haben.

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.

## 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

406-01