

طراحی، ساخت و مشخصه‌یابی آلیاژ یوتکتیک با آنتروپی بالا CuAlNiCrFe

هانیه نهاوندی

دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

حمید خرسند

دانشیار دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

چکیده

آلیاژهای آنتروپی بالا، علم نوینی از آلیاژها می‌باشند که با برخورداری از ویژگی‌های وسیع خود توانسته‌اند پیشرفت چشم‌گیری را در مهندسی مواد داشته باشند. آلیاژهای یوتکتیک با آنتروپی بالا (EHEAs)، به عنوان یک زیرگروه از آلیاژهای آنتروپی بالا، به دلیل قابلیت ریخته‌گری عالی، ریزساختارهای ظریف و یکنواخت، استحکام بالا و شکل‌پذیری خوب به کانون تحقیقاتی جدیدی در جامعه مواد فلزی تبدیل شده‌اند. در این پژوهش، بر اساس بررسی نمودارهای فازي به دست آمده از نرم‌افزار JMat Pro، استراتژی طراحی آلیاژ با آنتروپی بالا CuAlNiCrFe با استحکام و شکل‌پذیری بالا پیشنهاد شد. پس از طراحی در نرم‌افزار JMat pro و با توجه به خروجی‌های این نرم‌افزار، دو نمونه آلیاژ آنتروپی بالا CuAl_xNiCrFe با درصدهای متفاوتی از Al توسط فرآیند ذوب مجدد خلاء (VAR) تهیه شد. با در نظر گرفتن روابط ترمودینامیکی، آلیاژ آنتروپی بالا ساخته شده، صحت سنجی شده‌است. نتایج حاکی از آن است که ترکیب یوتکتیک را می‌توان در تحلیل مسیرهای انجماد پیش‌بینی کرد. ترکیب شیمیایی و ریزساختار آلیاژهای تهیه شده پس از ریخته‌گری با آنالیزهای Fe-SEM, EDS مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری (SEM)، نشان‌دهنده آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe با ساختار یوتکتیک می‌باشد. سختی در نمونه یوتکتیک اندازه‌گیری شد، نتایج میزان سختی قابل توجهی را در نمونه یوتکتیک ساخته شده گزارش می‌دهد. یافته‌های به‌دست آمده، رویکردهای جدیدی را برای طراحی آلیاژهای یوتکتیک آنتروپی بالا با خواص مکانیکی مطلوب به منظور استفاده گسترده در صنعت نشان می‌دهد.

واژگان کلیدی: آلیاژهای آنتروپی بالا، ریزساختار، آلیاژهای یوتکتیک، مدل ترمودینامیکی مدیم، علم نوین



مقدمه

مواد مورد استفاده بشر تقریباً بر پایه یک جزء ساده با خلوص اولیه است که با افزودن دیگر عناصر با خواص متفاوت خواص ثانویه ای به آن بخشیده می شود. ساخت یک آلیاژ به معنای ساخت مخلوطی از یک فلز اصلی که به آن فلز پایه می گویند به همراه یک یا چند عنصر دیگر می باشد. اگرچه تاکنون بسیاری از خواص توسط آلیاژها تأمین شده است اما هنوز نیاز به بهبود مواد مورد استفاده در برخی کاربردهای صنعتی وجود دارد.

این مهم قابل ذکر می باشد که با افزایش تعداد عناصر آلیاژی، ترکیبات بین فلزی و ساختارهای پیچیده به علت حلالیت محدود حالت جامد در آلیاژ تشکیل شده و موجب دشوار شدن تهیه، افزایش استحکام، ترد شدن و پیچیدگی تجزیه و تحلیل آلیاژ می شوند. اما اخیراً یه و همکاران و همچنین کانتور (Yeh, 2014) و همکاران توانستند با کشف و توسعه آلیاژهای با آنتروپی بالا بسیاری از مشکلات موجود در صنعت آلیاژ سازی را بر طرف سازند. آلیاژهای آنتروپی بالا (Chen, 2006) به دسته ای از مواد اطلاق می شود که ترکیبی از حداقل پنج و حداکثر سیزده عنصر مختلف با درصد اتمی مساوی و یا تقریباً مساوی (5-35 درصد) است. در واقع اختلاط تصادفی عناصر چندگانه باعث افزایش آنتروپی وضعیتی (ΔS_{conf}) می شود.

آلیاژهای آنتروپی بالا به عنوان آلیاژهای محلول جامد با خواص مقاومت به خوردگی بالا، مقاومت به سایش و همچنین پایداری حرارتی بالا شناخته شده اند. تاثیر خواص منحصر به فرد این آلیاژها موجب کاربردهای صنعتی گسترده آنها در صنایع مختلفی از جمله ابزار و قطعات دما بالا مانند پره توربین های گازی که نیاز به استحکام بالا، مقاوت به سایش و اکسیداسیون دارند، شده است (Zhang, 2009).

آلیاژهای یوتکتیک (Glicksman, 2010) جزء پرمصرف ترین آلیاژهای ریخته گری در صنعت می باشند. آلیاژهای یوتکتیک به دلیل داشتن ویژگی هایی از جمله مقاومت خوب در برابر خزش در دماهای بالا، ریزساختارهای قابل کنترل و مرزهای فاز کم انرژی توجه بسیاری را به خود جلب نموده اند آلیاژهای آنتروپی بالا با ساختار تک فاز BCC عموماً از شکل پذیری پایینی برخوردار می باشند و همینطور آلیاژهای HEA با ساختار تک فاز FCC دارای استحکام پایین و شکل پذیری بالاتری می باشند. براین اساس، با ساخت آلیاژهای یوتکتیک آنتروپی بالا با ساختار FCC+BCC می توان استحکام و انعطاف پذیری بالایی را به طور همزمان مشاهده کرد. بنابراین پیشنهاد شد که از مفهوم آلیاژهای یوتکتیک به منظور طراحی HEAs با خواص مکانیکی عالی استفاده کرد.

روش تحقیق

مدل ترمودینامیکی مدیما

ترمودینامیک رابطه میان متغیرهای ماکروسکوپی مانند دما، حجم و فشار است که خواص فیزیکی مواد را شرح می دهند. معیارهای ترمودینامیکی، شامل آنتالپی اختلاط (ΔH_{mix})، آنتروپی اختلاط (ΔS_{mix})، پارامتر Ω ، اختلاف اندازه اتمی (δ) و غلظت الکترون والانس (VEC) برای پیش بینی تشکیل محلول جامد در ترکیب آلیاژ CuAlNiCrFe محاسبه شد (Song, 2021)

معادلات لازم به منظور محاسبه پارامترها به صورت زیر بیان می شود:

$$\Delta H_{mix} = \sum_{i=1}^N \Omega_{ij} c_i c_j \quad (1)$$

$$\Omega_{ij} = 4\Delta H_{AB}^{mix} \quad (2)$$



آنتالپی اختلاط رابطه (1)، به منظور تشخیص سازگاری شیمیایی بین اجزای اصلی در آلیاژهای آنتروپی بالا مطرح می‌شود. با توجه به روابط بالا، پارامتر اندرکنش مذاب منظم بین عناصر i و j و ΔH_{AB}^{mix} آنتالپی اختلاط آلیاژهای دوتایی مایع می‌باشد.

پارامتر بعدی، دلتا است که به طور جامع اثر اختلاف اندازه اتمی در آلیاژهای چند جزئی را شرح می‌دهد:

$$\delta = 100 \times \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2} \quad (3)$$

که در این رابطه، N تعداد اجزا در سیستم آلیاژی، x_i درصد اتمی جزء i ، \bar{r} میانگین شعاع اتمی و r_i شعاع اتمی است.

مقادیر کم δ به معنای اختلاف اندازه اتمی کم، مناسب برای تشکیل محلول جامد و مشابه قانون هیوم-روتی (Zhang, 2007) در محلول جامد دوتایی است. آنتالپی اختلاط بسیار مثبت موجب جدایش عناصر مختلف آلیاژی و آنتالپی اختلاط بسیار منفی موجب ترکیب شدن عناصر و ایجاد ترکیب میشود با افزایش مقدار δ محلول جامد به سمت منظم شدن سوق داده میشود. بنابراین تشکیل محلول جامد نیازمند مقادیر $1.1 \leq \Omega$ و $6.6\% \leq \delta$ و $5 \text{ kJ/mol} \leq \Delta H_{mix}^{liq} \leq 16.25 \text{ kJ/mol}$ می‌باشد (Yeh, 2014).

علاوه بر پارامترهای بیان شده دو پارامتر دیگر نیز در تشکیل محلول جامد تاثیرگذار می‌باشد که از طریق روابط زیر قابل محاسبه است. غلظت الکترون والانس برای ارزیابی پایداری فاز ترکیبات بین‌فلزی محاسبه می‌گردد:

$$VEC = \sum_{i=1}^n (VEC)_i \quad (4)$$

که (VEC) برای عنصر آم است. در محاسبه غلظت الکترون والانس این نکته حائز اهمیت می‌باشد که VEC اثر قاطعانه‌ای در تعیین محلول‌های جامد BCC یا FCC در HEAs دارد و فاز FCC در $VEC \geq 8$ و فاز BCC در $VEC < 6.87$ می‌گیرد (GUO Sheng, 2011).

به منظور محاسبه آنتروپی وضعیتی یک سیستم از رابطه بولتزمن استفاده کرد:

$$\Delta S_{mix} = -R \sum_{i=1}^N X_i \ln X_i \quad (5)$$

یه با اشاره به قانون ترمودینامیک آنتروپی وضعیتی آلیاژ دوتایی (رابطه 5)، بیشترین مقدار آنتروپی را هنگام برابر بودن نسبت‌های اتمی عناصر دانست. در جدول 1 مقادیر مربوط به پارامترهای شبکه برای پوشش آنتروپی بالا CuAlNiCrFe با استفاده از مدل مدیما ارائه شده است (Yeh, 2014):

جدول 1 محاسبه پارامترهای آنتروپی بالا بوسیله مدل مدیما.

| θ (Å) | VEC | ΔH_{mix} ($\frac{J}{mol}$) | ΔS_{conf} |
|--------------|-----|-----------------------------------------|-------------------|
| 5.617022 | 7.6 | 0.32 | 13.38 |

محاسبه پارامتر شبکه

به منظور محاسبه پارامتر شبکه، از قانون مخلوطها (رابطه 6) استفاده شد. پارامتر شبکه برای هر دو ترکیب از آلیاژ محاسبه شده و در جدول 2 ارائه شد. نتایج نشان دهنده آن است که با افزایش غلظت AL، پارامتر شبکه ترکیب کاهش میابد. به منظور بررسی بیشتر پارامتر شبکه برای ترکیبی با درصد AL بالاتر محاسبه شد (Chang, 2015). نتایج نشان می دهد با افزایش درصد AL پارامتر شبکه می تواند به میزان قابل توجهی کوچک شود. این نتایج نشان دهنده پیوند قوی AL با سایر عناصر تشکیل دهنده است. ایجاد پیوند قوی بین AL و سایر عناصر باعث کاهش طول پیوند و همچنین کاهش پارامتر شبکه می شود (RA Swalin, J Arents, 1996).

$$a_{mix} = \sum X_i a_i \quad (6)$$

جدول 2 محاسبه پارامترهای شبکه.

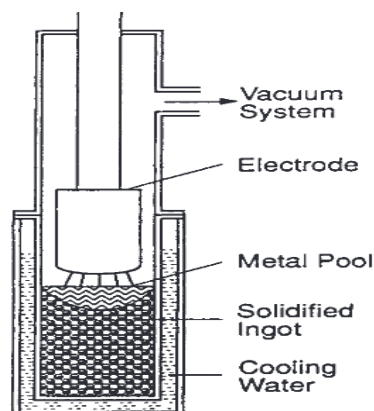
| ترکیب | پارامتر شبکه (A) |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| CuAlNiCrFe | 4.034 |
| Cu _{18.18} Al _{27.27} Ni _{18.18} Cr _{18.18} Fe _{18.18} | 3.831 |
| Cu _{14.28} Al _{42.85} Ni _{14.28} Cr _{14.28} Fe _{14.28} | 3.391 |

نرم افزار J Mat Pro

JMat Pro یک نرم افزار شبیه سازی حاوی مدلهایی برپایه فیزیک مواد می باشد. این نرم افزار برای بررسی خواص نهایی آلیاژهای چندفازی موجود در صنعت استفاده می شود و خواص عناصر را به منظور آلیاژسازی بهتر محاسبه می کند. با استفاده از این نرم افزار می توان فازهای تعادلی پایدار و نیمه پایدار، ویژگی ها و رفتار انجمادی، خواص مکانیکی، خواص فیزیکی و ترموفیزیکی، دگرگونی های فازی و خواص شیمیایی را مورد بررسی قرار داد. از جمله ویژگی ها و امکانات این نرم افزار می توان به عملیات حرارتی بدون انجام محاسبات، بررسی تحولات فازی و نمودارهای TTT, CCT، بررسی خواص فیزیکی در طول انجماد و همچنین بررسی طیف گسترده ای از خواص مواد اشاره کرد. در این پژوهش، با استفاده از نرم افزار JMat Pro مسیرهای انجمادی ممکن برای آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe مشخص شد سپس با استفاده از خروجی این نرم افزار آلیاژ یوتکتیک CuAlNiCrFe با آنتروپی بالا طراحی و ساخته شد.

تجهیزات و آماده سازی نمونه

روش ذوب مجدد قوس خلاء (VAR)، یک نوع فرآیند تصفیه جهت از بین بردن ناخالصی ها و تخلخل ها از نمونه ریخته گری شده، می باشد. در شکل 1 شماتیکی از فرآیند ذوب مجدد قوس خلاء نشان داده شده است (PA Davidson, X He, 2000).



شکل 1 شماتیکی از فرآیند VAR

در این روش ذوب از طریق استفاده از یک جریان بالا پایدار (چند کیلو آمپر) قوس DC انجام می‌شود. انرژی ناشی از قوس جهت ذوب مجدد استفاده می‌شود. مواد مذاب به داخل یک بوته مسی (آند) که توسط آب خنک می‌گردد، ریخته می‌شود و با یک قطر بزرگتر، همگن و بدون تخلخل جامد می‌شود (RL Williamson, 1987).

در این پژوهش، آلیاژسازی توسط روش ذوب مجدد خلاء (VAR) به منظور دستیابی به ترکیب آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe انجام شد. به منظور اطمینان از خلوص، مواد اولیه خریداری شده توسط دستگاه EXPLORER تحت آزمون XRF قرار گرفت. پس از عملیات سنباده زنی و پولیش کاری، نمونه‌های خالص اولیه داخل استون با خلوص 100 درصد و حمام مافوق صوت با فرکانس 28 KHz و توان 100 w قرار گرفت. دو نمونه آلیاژ آنتروپی بالا، توسط دستگاه (IR-VAR-1) با استفاده از عناصر اولیه Cu, Al, Ni, Cr, Fe با خلوص 99.99 درصد تهیه شد. شکل 2 تصویری از آلیاژ آنتروپی بالا ساخته شده به روش ذوب مجدد خلاء را نشان می‌دهد. به منظور تهیه یک آلیاژ همگن، فرآیند ذوب 5 مرتبه انجام شد. در جدول 3 درصد عناصر استفاده شده برای ساخت آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe ارائه شده است.



شکل 2 آلیاژ آنتروپی بالا ساخته شده.



جدول 3 محاسبات درصد اتمی و درصد وزنی عناصر آلیاژ آنتروپی بالا 1 و 2.

| وزن اتمی | درصد وزنی | درصد اتمی | عناصر |
|-----------|-------------|-----------|-------|
| 63.546 | 24.72010268 | 20 | Cu |
| 26.981539 | 10.49611958 | 20 | Al |
| 58.6934 | 22.83238717 | 20 | Ni |
| 51.9961 | 20.22706278 | 20 | Cr |
| 55.845 | 21.7243278 | 20 | Fe |
| | | 100 | T |

| وزن اتمی | درصد وزنی | درصد اتمی | عناصر |
|-----------|-------------|-----------|-------|
| 63.546 | 23.4874664 | 18.18 | Cu |
| 26.981539 | 14.95911601 | 27.27 | Al |
| 58.6934 | 21.6938794 | 18.18 | Ni |
| 51.9961 | 19.21846618 | 18.18 | Cr |
| 55.845 | 20.641072 | 18.18 | Fe |
| | | 100 | T |

آلیاژهای ساخته شده توسط روش ذوب مجدد خلاء جهت بررسی‌های ریزساختاری تحت عملیات متالوگرافی توسط دستگاه (قطر صفحه 20 سانتی متر، سرعت چرخش 700 rpm) Polishing Machine قرار گرفت. شکل 3 تصویری از دستگاه متالوگرافی استفاده شده جهت صیقل‌دهی و آماده‌سازی سطح تارگت‌های ساخته شده به منظور بررسی‌های میکروسکوپی را نشان می‌دهد.



شکل 3 تصویر دستگاه متالوگرافی.

برای آچ نمونه‌ها از محلولی با ترکیب $(HCl:HNO_3 = 3:1)$ استفاده گردید. به منظور بررسی ریزساختاری، نمونه توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مدل VEGA 3 مورد بررسی قرار گرفت. همچنین نتایج آنالیز EDS به منظور اطمینان از آنتروپی بالا بودن نمونه ساخته شده و نحوه توزیع عناصر گزارش شد. سختی سنجی به کمک دستگاه سختی سنجی مدل SUH-200 در 3 نقطه از سطح انجام گرفت.

یافته ها

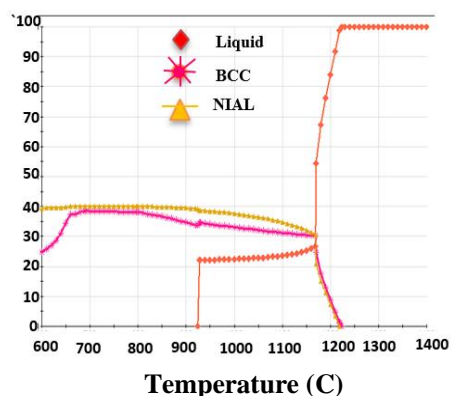
طراحی بوسیله نرم افزار JMat Pro

به منظور پیش‌بینی مسیرهای انجمادی ممکن برای رسیدن به ساختار یوتکتیک در آلیاژ آنتروپی بالا $CuAlNiCrFe$ از نرم افزار JMat Pro استفاده شد.

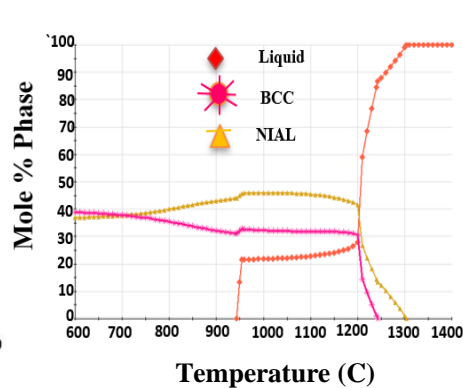
شکل 4 مسیرهای انجماد را برای آلیاژ $CuAl_xNiCrFe$ در درصدهای متفاوتی از Al ($x=1, x=1.5, x=2, x=2.5, x=3$) نشان می‌دهد. منحنی‌های قرمز، طلایی و نارنجی به ترتیب نشان دهنده مسیرهای انجماد مایع، $NiAl$ و BCC می‌باشد. در نمودارهای فاز، نقطه‌ای که کمترین نقطه ذوب را نشان می‌دهد همان نقطه یوتکتیک است. به بیانی دیگر، نقطه‌ای که فاز مایع L مستقیماً با فاز جامد $(\alpha + \beta)$ هم‌مرز می‌شود (William F, 2006). با توجه به نمودارهای به دست آمده از نرم افزار JMat Pro، نتایج نشان‌دهنده آن است که آلیاژ $CuAl_xNiCrFe$ ($x=1$) در ترکیب هم‌اتمی خود دارای ساختار یوتکتیک می‌باشد و در نمودار (الف، $x=1$) دو منحنی BCC ، $NiAl$ در یک نقطه مشخص با منحنی مایع (Liquid) هم‌مرز می‌شود. مشاهده شد که در مقادیر دیگری از Al ساختاری کاملاً متفاوت از ساختار یوتکتیک حاصل می‌شود. با توجه به نمودار الف $x=1$ ، در دمای حدود 1200 درجه سانتی‌گراد احتمال انجام یک واکنش یوتکتیک برای ترکیب هم‌اتمی $CuAl_xNiCrFe$ پیش‌بینی می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش غلظت Al درصد فاز یوتکتیک در ساختار کاهش می‌یابد. نتایج مقایسه نمودارهای فاز به دست آمده از نرم افزار، نشان می‌دهد که با افزایش 8 درصدی Al ساختار یوتکتیک در نمودارها مشاهده نمی‌شود. با توجه به اینکه ایجاد ساختار یوتکتیک موجب افزایش همزمان شکل‌پذیری و انعطاف آلیاژ می‌شود، می‌توان نتیجه گرفت که با استفاده از خروجی نرم افزار JMat Pro می‌توان علاوه بر پیش‌بینی مسیرهای انجمادی ممکن، خواص مکانیکی ماده را هم تا حدود زیادی پیش‌بینی کرد.



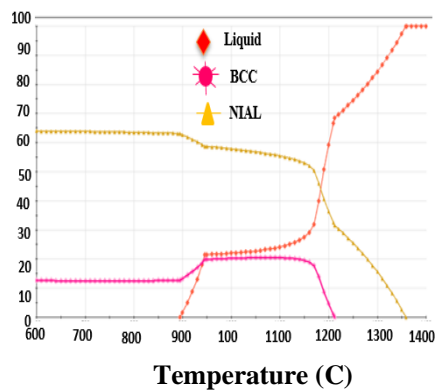
NI20.0-AL-20.0CR-20.0CU-20.0FE-20.0



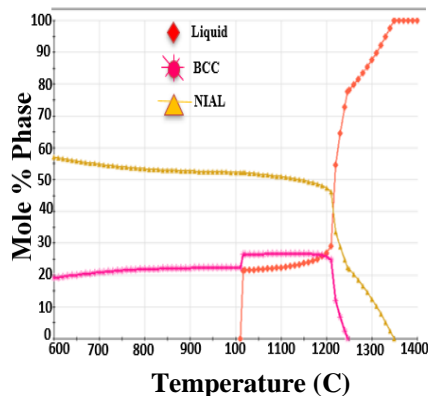
NI18.18-AL-27.27CR-18.18CU-18.18FE-18.18



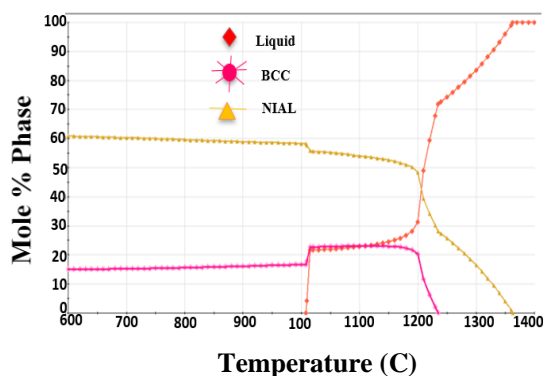
NI14.28-AL-42.85CR-14.28CU-14.28FE-14.28



NI16.66-AL-33.32CR-16.66CU-16.66FE-16.66



NI15.38-AL-38.46CR-15.38CU-15.38FE-15.38

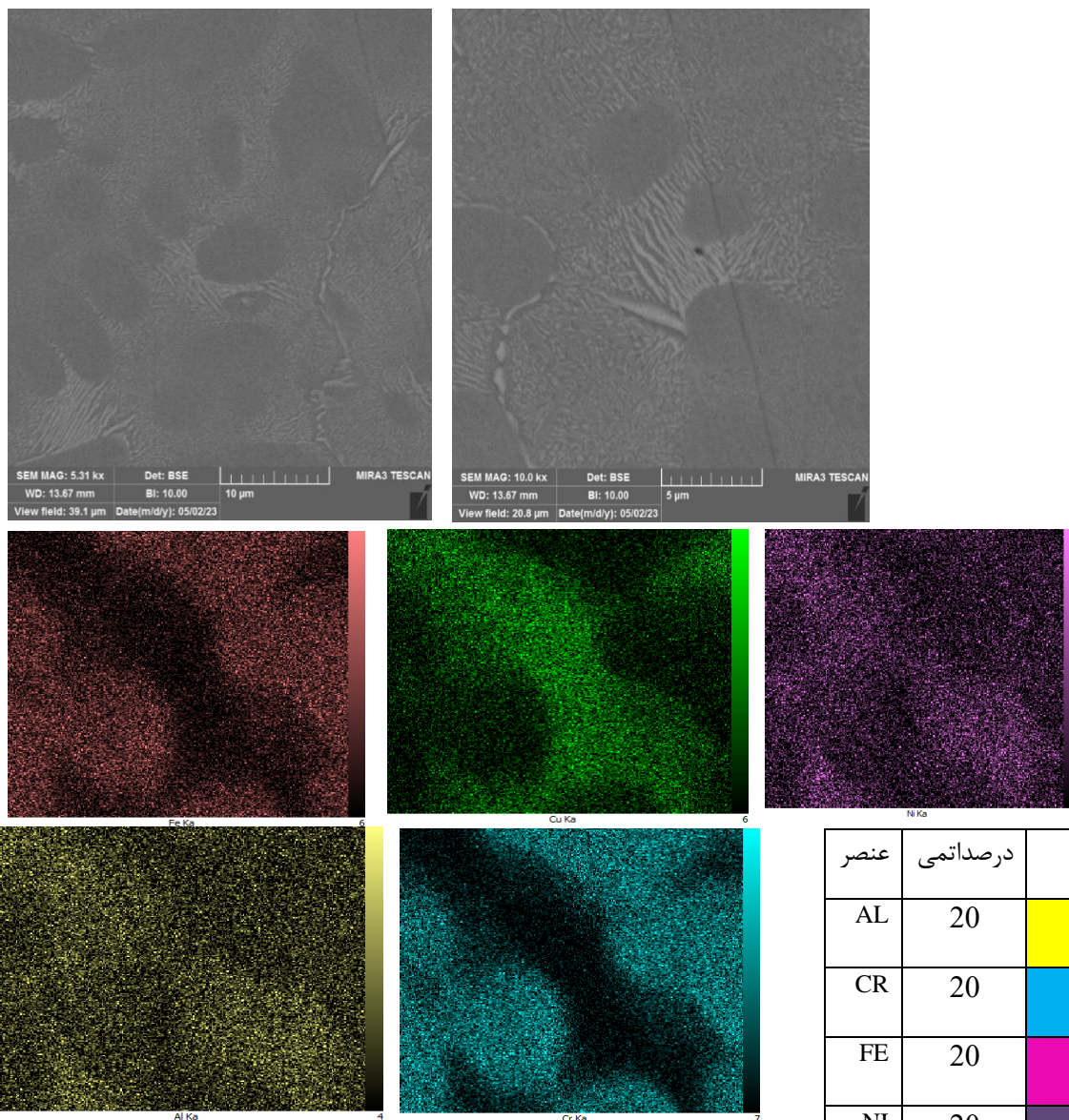


شکل ۴ مسیرهای انجمادی آلیاژ آنتروپی بالا $\text{CuAl}_x\text{NiCrFe}$ در درصدهای متفاوتی از Al.



نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی (FE-SEM)

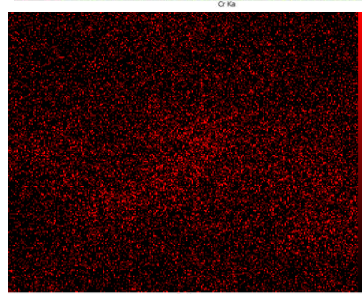
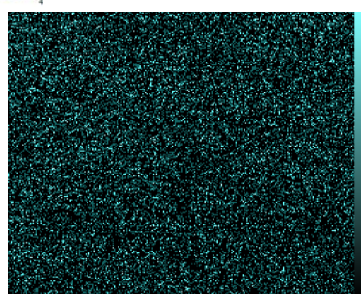
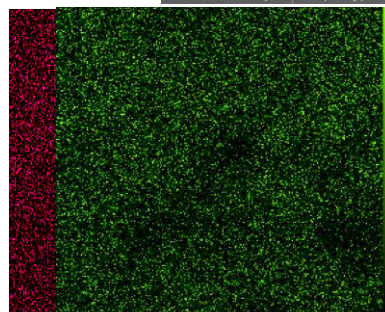
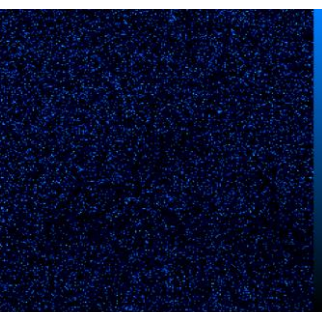
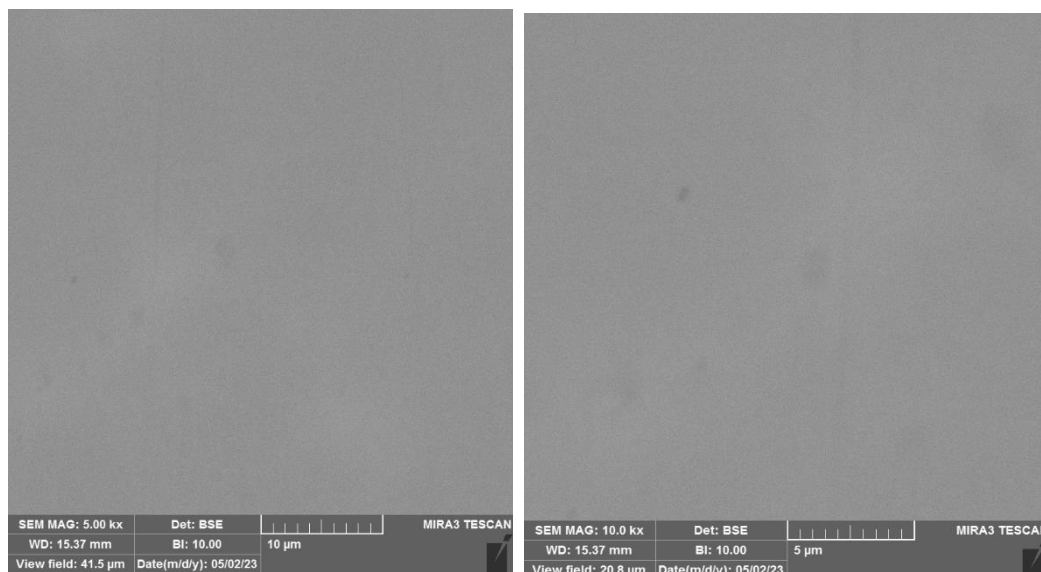
پس از طراحی آلیاژ و پیش‌بینی مسیرهای انجمادی در نرم‌افزار JMat Pro، دو نمونه با درصد‌های اتمی ذکر شده در جدول 4 توسط فرآیند ریخته‌گری ساخته شد. به منظور بررسی‌های ریزساختاری، دو نمونه تهیه شده تحت آزمون FE-SEM قرار گرفت. شکل 5 تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از آلیاژ هم‌اتمی CuAlNiCrFe را نشان می‌دهد.



شکل 5 تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نمونه CuAlNiCrFe.



ریزساختار آلیاژ نشان‌دهنده دندریته‌ها و مناطق یوتکتیکی با ساختار لایه‌ای می‌باشد. این آلیاژ شامل یک فاز غنی از آهن، کروم و مس با ساختار FCC و یک فاز غنی از NIAL با ساختار BCC می‌باشد. نتایج حاکی از آن است که فاز یوتکتیک ایجاد شده متشکل از هر دو فاز با ساختار FCC+BCC است. با افزایش دما درصد یوتکتیک و فاز BCC افزایش یافته‌است و همچنین فاصله بین لایه‌های یوتکتیک تغییر کرده‌است. با توجه به شکل 5، طرح لکه‌های پلنگی در تصاویر SEM نشان‌دهنده ساختار یوتکتیک ترکیب هم‌اتمی CuAlNiCrFe می‌باشد. شکل 6 تصاویر ریزساختار آلیاژ آنروپی بالا ساخته شده با درصدهای اتمی $\text{Cu}_{18.18}\text{Al}_{27.27}\text{Ni}_{18.18}\text{Cr}_{18.18}\text{Fe}_{18.18}$ را نمایش می‌دهد.

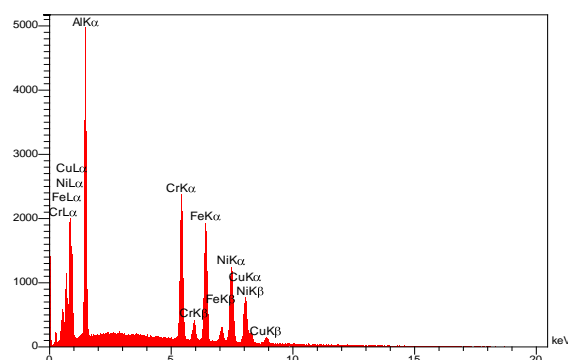
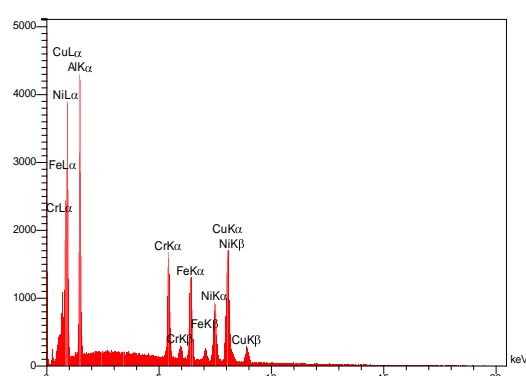
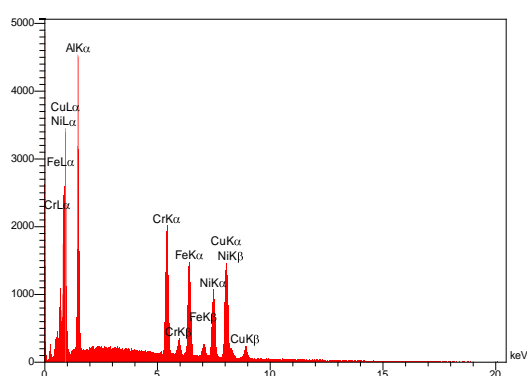
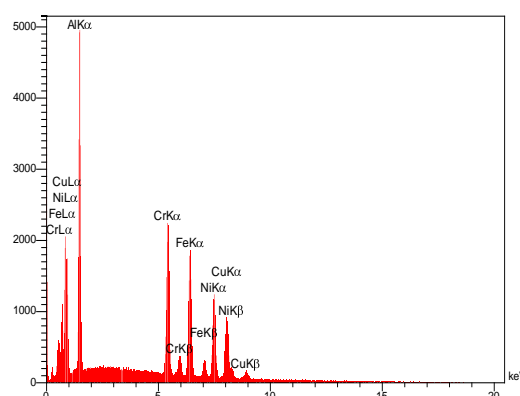
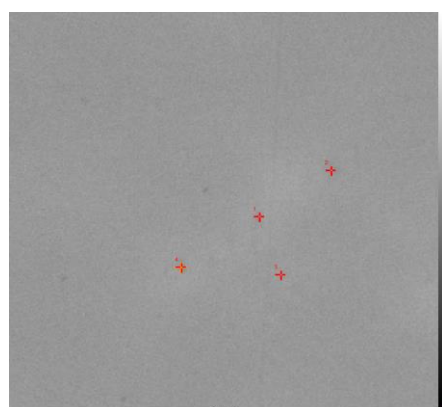


| عنصر | درصد اتمی | |
|------|-----------|--|
| AL | 27.27 | |
| CR | 18.18 | |
| FE | 18.18 | |
| NI | 18.18 | |
| CU | 18.18 | |

شکل 6 تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نمونه 2.



نتایج حاصل از تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری نشان‌دهنده تطابق بالای آزمایشات تجربی و شبیه‌سازی نرم‌افزاری می‌باشد. آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe در درصد اتمی برابر دارای ساختار یوتکتیک است و در درصد اتمی ذکر شده در جدول 4 ساختار یوتکتیکی در تصاویر SEM به‌دست آمده یافت نشد، این موضوع نشان‌دهنده صحتی بر نتایج نرم افزار JMat Pro می‌باشد. در این پژوهش با استفاده از مدل نیمه تجربی مدیما پارامترهای ترمودینامیکی پوشش آنتروپی بالا CuAlNiCrFe محاسبه و در جدول 1 ارائه شد. نتایج طیف سنجی تفکیک انرژی پرتو ایکس، هیچ تجمعی از یک عنصر را نمایش نمی‌دهد.



شکل 7 تصاویر آنالیز EDS آلیاژ آنتروپی بالا CuAlNiCrFe.



با توجه به محدوده محاسبات انجام شده و نتایج آنالیز EDS گزارش شده از 4 نقطه متفاوت در شکل 7 یکنواختی در توزیع عناصر، نشان دهنده آنتروپی بالا بودن و همگن بودن شیمیایی ترکیب در آلیاژ CuAlNiCrFe می‌باشد. مقدار سختی متوسط برای هر دو آلیاژ توسط قوانین مخلوطها (رابطه 6) محاسبه شده و در جدول 4 ارائه شد. پس از آن، سختی در دو نمونه هم‌اتمی و غیرهم‌اتمی از آلیاژ آنتروپی بالا در 3 نقطه از سطح در 3 مقیاس متفاوت به صورت تجربی اندازه گیری شده و نتایج در جدول 6 گزارش شد. با توجه به مقایسه نتایج، اعداد سختی به دست آمده از قانون مخلوطها با اعداد گزارش شده به صورت تجربی متفاوت است، افزایش عدد سختی می‌تواند در اثر استحکام‌دهی ناشی از محلول جامد باشد (Gau, 2022).

$$Hv_{MIX} = \sum C_i(Hv_i) \quad (7)$$

با توجه به نتایج به دست آمده در جدول 5، سختی در نمونه هم‌اتمی با ساختار یوتکتیک مقدار قابل توجهی بالاتر از سختی در نمونه دیگر است. نتایج نشان‌دهنده آن است که با افزایش درصد یوتکتیک در ساختار، سختی نمونه به میزان زیادی افزایش می‌یابد.

جدول 4 مقادیر سختی محاسبه شده توسط قانون مخلوطها.

| $Hv_{MIX} = \sum C_i(Hv_i)$ | | | $Hv_{MIX} = \sum C_i(Hv_i)$ | | |
|-----------------------------|------------------|-----------|-----------------------------|------------------|-----------|
| عناصر | سختی هر عنصر (V) | درصد اتمی | عناصر | سختی هر عنصر (V) | درصد اتمی |
| AL | 167 | 27.27 | AL | 167 | 20 |
| FE | 608 | 18.18 | FE | 608 | 20 |
| CU | 369 | 18.18 | CU | 369 | 20 |
| CR | 1060 | 18.18 | CR | 1060 | 20 |
| NI | 638 | 18.18 | NI | 638 | 20 |
| متوسط | 520 Hv | | متوسط | 560 Hv | |
| سختی | | | سختی | | |

| نمونه | برینل | ویکرز | | | راکول C | | | | |
|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| شماره 1 | شماره 2 | شماره 3 | شماره 1 | شماره 2 | شماره 3 | شماره 1 | شماره 2 | شماره 3 | میانگین |
| 543 | 560 | 525 | 577 | 590 | 565 | 54 | 55 | 53 | 577.33 |
| 293 | 321 | 302 | 310 | 336 | 318 | 31 | 34 | 32 | 321.33 |



بحث و نتیجه گیری

با توجه به ویژگی‌ها و امکانات نرم افزار JMat Pro و امکان طراحی و محاسبه مسیرهای انجماد در این برنامه، طراحی و ساخت آلیاژ یوتکتیک آنتروپی بالا CuAlNiCrFe با موفقیت انجام شد. مشاهده شد که هر دو آلیاژ ساخته شده، با توجه به محاسبات انجام گرفته با مدل نیمه تجربی مدیما و خروجی‌های نرم افزار، آنتروپی بالا بوده و نمونه هم‌اتمی دارای ساختار یوتکتیک می‌باشد. مشاهده شد که با تغییر غلظت AL مسیرهای انجمادی تغییر خود کرد. سختی در نمونه یوتکتیک آنتروپی بالا اندازه‌گیری شد. نتایج نشان‌دهنده سختی بالای این نمونه در مقایسه با نمونه با درصد اتمی دیگر می‌باشد. ریزساختار دندردیتی و لایه لایه به دست آمده از نتایج نشان‌دهنده خواص مکانیکی مطلوب این آلیاژ است.

منابع

- Zhang, Y., Zuo, T. T., Tang, Z., Gao, M. C., Dahmen, K. A., Liaw, P. K., & Lu, Z. P. (2014). Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in materials science*, 61, 1-93.
- Wu, J. M., Lin, S. J., Yeh, J. W., Chen, S. K., Huang, Y. S., & Chen, H. C. (2006). Adhesive wear behavior of AlxCoCrCuFeNi high-entropy alloys as a function of aluminum content. *Wear*, 261(5-6), 513-519.
- Zhang, K. B., Fu, Z. Y., Zhang, J. Y., Shi, J., Wang, W. M., Wang, H., ... & Zhang, Q. J. (2009). Nanocrystalline CoCrFeNiCuAl high-entropy solid solution synthesized by mechanical alloying. *Journal of Alloys and Compounds*, 485(1-2), L31-L34.
- Lu, Y., Dong, Y., Guo, S., Jiang, L., Kang, H., Wang, T., ... & Li, T. (2014). A promising new class of high-temperature alloys: eutectic high-entropy alloys. *Scientific reports*, 4(1), 6200.
- Yang, Z. (2019). Increasing returns to scale in energy-intensive sectors and its implications on climate change modeling. *Energy Economics*, 83, 208-216.
- Dong, Y., Yao, Z., Huang, X., Du, F., Li, C., Chen, A., ... & Zhang, Z. (2020). Microstructure and mechanical properties of AlCoxCrFeNi_{3-x} eutectic high-entropy-alloy system. *Journal of Alloys and Compounds*, 823, 153886.
- Jin, X., Bi, J., Zhang, L., Zhou, Y., Du, X., Liang, Y., & Li, B. (2019). A new CrFeNi₂Al eutectic high entropy alloy system with excellent mechanical properties. *Journal of Alloys and Compounds*, 770, 655-661.
- Wu, Q., Wang, Z., Zheng, T., Chen, D., Yang, Z., Li, J., ... & Wang, J. (2019). A casting eutectic high entropy alloy with superior strength-ductility combination. *Materials Letters*, 253, 268-271.
- Vrtnik, S., Guo, S., Sheikh, S., Jelen, A., Koželj, P., Luzar, J., ... & Dolinšek, J. (2018). Magnetism of CoCrFeNi₂Al eutectic high-entropy alloys. *Intermetallics*, 93, 122-133.
- Huo, W., Zhou, H., Fang, F., Zhou, X., Xie, Z., & Jiang, J. (2018). Microstructure and properties of novel CoCrFeNi₂Al eutectic high-entropy alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 735, 897-904.
- Glicksman, M. E. (2010). *Principles of solidification: an introduction to modern casting and crystal growth concepts*. Springer Science & Business Media.
- Song, H., Lee, S., & Lee, K. (2021). Thermodynamic parameters, microstructure, and electrochemical properties of equiatomic TiMoVWCr and TiMoVNbZr high-entropy alloys prepared by vacuum arc remelting. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 99, 105595.
- Zhang, Y., & Zhou, Y. J. (2007, October). Solid solution formation criteria for high entropy alloys. In *Materials science forum* (Vol. 561, pp. 1337-1339). Trans Tech Publications Ltd.
- Sheng, G. U. O., & Liu, C. T. (2011). Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase. *Progress in Natural Science: Materials International*, 21(6), 433-446.
- Murty, B. S., Yeh, J. W., Ranganathan, S., & Bhattacharjee, P. P. (2014). High-Entropy Alloys: Basic Concepts. High-Entropy Alloys. *Boston*, Butterworth-Heinemann, 13-35.
- Lin, C. M., Juan, C. C., Chang, C. H., Tsai, C. W., & Yeh, J. W. (2015). Effect of Al addition on mechanical properties and microstructure of refractory AlxHfNbTaTiZr alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 624, 100-107.
- Swalin, R. A., & Arents, J. (1962). Thermodynamics of solids. *Journal of The Electrochemical Society*, 109(12), 308C.
- Davidson, P. A., He, X., & Lowe, A. J. (2000). Flow transitions in vacuum arc remelting. *Materials science and technology*, 16(6), 699-711.
- Williamson, R. L., Zanner, F. J., Bertram, L. A., & Peebles, H. C. (1987). Plasma studies in vacuum arc remelting. *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, 98.
- William F. Smith, & Hashemi, J. (2006). *Foundations of materials science and engineering*. McGraw-Hill Publishing.
- Li, X., Gao, X., Lu, H., Shi, C., Guo, N., Yin, F., & Zhu, G. (2022). Microstructure evolution and mechanical properties of AlCrFe₂Ni₂ (MoNb) x high entropy alloys. *Journal of Materials Research and Technology*, 17, 865-875.



Design, fabrication and characterization of CuAlNiCrFe eutectic alloy with high entropy

Haniyeh Nahavandi

Identification and Selection of Engineering
Materials, KN Toosi University of Technology,
Tehran, Iran

Hamid Khorsand

Materials Engineering, KN Toosi University of
Technology, Tehran, Iran

Abstract

High entropy alloys are a new science of alloys that have made significant progress in material engineering with their wide features. High-entropy eutectic alloys (EHEAs), as a subgroup of high-entropy alloys, have become a new research focus in the metallic materials community due to their excellent castability, fine and uniform microstructures, high strength, and good formability. In this research, based on the analysis of phase diagrams obtained from JMat Pro software, a design strategy for high entropy CuAlNiCrFe alloy with high strength and ductility was proposed. After designing in JMat pro software, the alloy was prepared by vacuum remelting process (VAR). Considering the thermodynamic relations, the high entropy alloy was fabricated and validated. The results indicate that the eutectic composition can be analyzed in the path analysis. Solidification was predicted. The chemical composition and microstructure of the prepared alloy after pouring were analyzed by Fe-SEM, EDS analysis. Transmission electron microscope (SEM) images show high entropy structure. Hardness in eutectic sample was measured, the results report a significant CuAlNiCrFe alloy with eutectic amount of hardness in the fabricated eutectic sample. The obtained findings suggest new approaches to design high entropy eutectic alloys with favorable mechanical properties for widespread use in industry

Keywords High entropy alloys, microstructure, eutectic alloys, Medima thermodynamic model, modern science