

# AZ ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÁSOK IPARI JÖVŐJE: AZ INNOVÁCIÓ HÉTKÖZNAPI LÉPÉSEI A GYAKORLATBAN A TUDOMÁNY, A TECHNOLÓGIA ÉS AZ IPAR HATÁRÁN

Temesi Ottó<sup>1,®</sup>, Varga Lajos Károly<sup>1</sup>, Gulyás Gábor<sup>2</sup>

<sup>1</sup>H-ION Kft., Budapest, Székesfehérvár

<sup>2</sup>Metalloexpert Kft., Budapest

®E-mail: otto.temesi@h-ion.hu

## Bevezetés

Az anyagtudomány történelmi szerepét mi sem mutatja jobban, mint hogy az emberi kultúra fő (történelem előtti) korszakait is a meghatározó anyagaik alapján neveztük el: kőkorszak, bronzkor és vaskor – egyesek szerint mostanában a szilícium korszakát éljük. Az anyagok fejlődése mindig is kulcsfontosságú volt a technológiai előrelépésekben, mivel az anyagok tulajdonságainak megértése tette lehetővé új eszközök és technológiák kifejlesztését. Sokáig az anyagtudományt a fizika vagy a kémia területéhez sorolták, mivel az anyagok alapvető tulajdonságai ezen tudományok keretein belül voltak leírhatók. Az anyagtudomány önálló területté válása a 20. század során következett be, ahogy a fizikai, kémiai, és mérnöki ismeretek egyre mélyebb integrációja vált szükségessé az összetett anyagszerkezetek és tulajdonságok megértéséhez.

A terület megbecsülését tükrözik a Nobel-díjak is, amelyekkel elismerték az anyagtudomány különleges eredményeit. Az első anyagtudományi Nobel-díjat Charles Édouard Guillaume svájci-francia mérnök kapta 1920-ban az invar ötvözet (tömegszázalékban: 64 Fe, 35 Ni) felfedezéséért. Az invar ötvözet kiemelkedő tulajdonsága, hogy rendkívül alacsony hőtágulási együtthatóval rendelkezik, így mérete gyakorlatilag független a hőmérséklet-változástól 150 °C alatt. Guillaume nemcsak az ötvözet összetételét dolgozta ki, hanem gyártási technológiáját is, ami lehetővé tette precíziós mérőműszerek és hőmérsékleti eltolódástól mentes precíziós mechanikai órák fejlesztését. Az invar felfedezése áttörést jelentett a hőtágulás problémájának megoldásában, és hatalmas előrelépést tett lehetővé az ipar számára, különösen a mérnöki és geodéziai eszközök pontosságának növelésében.

Guillaume felfedezése rámutatott arra, hogy az anyagtudomány egy új, integrált területként képes alapvetően új tulajdonságokkal rendelkező anyagokat biztosítani, amelyek előre nem látott módon formálhatják át a technológiai lehetőségeket. Az invar ötvözet kidolgozása egyben azt is demonstrálta, hogy az anyagok tulajdonságainak tudományos igényű kiaknázása nemcsak a természet törvényeinek ismeretét kívánja meg, hanem a gyakorlati alkalmazhatóságát és a gyártástechnológiáit is, amelyek szintén a modern anyagtudomány integrált részét képezik.

Említhetnénk más Nobel-díjakat is, amelyeket az anyagtudomány terén vagy közvetlen vonatkozással osztottak ki, például a grafén felfedezéséért (Andre Geim és Konstantin Novoselov, 2010), a kvázikristályok feltárásáért (Dan Shechtman, 2011), a kék LED fejlesztéséért (Isamu Akasaki, Hiroshi Amano, Shuji Nakamura, 2014), a topológiai fázisátmenetek és topológiai anyagok megértéséért (David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane, J. Michael Kosterlitz, 2016), a lítium-ion akkumulátorokért (John B. Goodenough, M. Stanley Whittingham, Akira Yoshino, 2019), valamint a kvantumpöttyök kifejlesztéséért (Moungi Bawendi, Louis Brus, Alexei Ekimov, 2023). Ezek mind olyan jelentős eredmények, amelyek



Varga Lajos Károly szilárdtestfizikus, kandidátus, a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont nyugdíjasa, jelenleg a H-ION Kft. munkatársa. Kutatási területei: híg ötvözetek, amorf fémötvözetek, nanokristályos finemet, nagy entrópiájú ötvözetek és azok alkalmazásai. Két EU- és egy NATO-pályázat magyar koordinátoraként gyarapította fémfizikai műszerparkját. 12 diplomamunka és 9 PhD-dolgozat készült el vezetésével. Két nemzetközi konferenciát szervezett a lágy mágneses anyagok témakörben (1999, 2013).



Temesi Ottó fizikus-mérnök (ELTE), PhD-hallgató (ELTE). A H-ION Kutató, Fejlesztő és Innovációs Kft. társalapítója, K+F+I igazgatója és K+F+I tanácsadó. Szakterülete: speciális és szuperötvözetek, energiatárolási rendszerek (fém-ion akkumulátorok, hidrogéntárolás), új generációs szigetelőanyagok; anyagtudományi és anyagtechnológiai K+F+I projektek tervezése, vezetése. Doktori értekezésének címe: „Nagy entrópiás szuperötvözetek tervezése és vizsgálata magas hőmérsékletű alkalmazásokhoz”.



Gulyás Gábor fizikus-mérnök (ELTE), PhD-hallgató (ELTE), a Metalloexpert Kft. vezető kutatómérnöke. Szakterülete: vékonyréteg- és vákuumtechnika, lágy mágneses anyagok, nagy entrópiás ötvözetek funkcionális tervezése és 3D fémnyomatási technológiákba történő integrálása; metallurgiai célgépek és technológiák fejlesztése. Doktori értekezésének címe: „Magas hőmérsékletű termoelektromos generátor, nagy entrópiás ötvözetre alapozva”.

az anyagtudomány különleges területeire és az anyagok innovatív tulajdonságaira épülnek. De most koncentráljunk arra, mi is a közös ezekben a díjazott nagyszerű anyagtudományi felfedezésekben, felismerésekben! Az egyik közös vonás ezekben a felfedezésekben az a különleges, nem mindenhol elérhető technikai előfeltétel, amely az új anyagok létrehozásához és egyedi tulajdonságaik feltárásához szükséges volt. Például az invar ötvözetek előállításához a Heraeus cég által kidolgozott hitegetégyes olvasztási technika vált nélkülözhetetlenné, mivel ez megakadályozta az olvadék reakcióját az olvasztótégely falával, ezzel fenntartva az ötvözet tisztaságát és stabilitását.

A kék LED fejlesztése során a molekuláris sugárnyaláb-epitaxia (MBE) technológiát alkalmazták, amelyet a Knudsen-forrás és a visszaverődésielektron-diffrakció (REED) detektor egészített ki, lehetővé téve az ultravékony InGaN réteg szendvicselését két gallium-nitrid réteg közé. E technikai újítások pontos rétegfelépítést biztosítottak, ami szükséges a kék fényt kibocsátó félvezető heterostrukturák működéséhez.

A grafén felfedezése során az anyag különleges, kétdimenziós szerkezetét fizikai leválasztással (mikromechanikai exfoliálással) érték el, amely az elektronikus tulajdonságok szempontjából forradalmi áttörést jelentett. Ehhez nélkülözhetetlen volt az atomi rétegeket mikroszkóposan stabil formában leválasztó eljárás alkalmazása, amelyhez speciálisan éles szerszámokra és ultratiszta környezetre volt szükség, hogy megakadályozzák az anyag szerkezetének szennyeződését.

A kvázikristályok felfedezése új megértést hozott a kristálytanban, mivel ezek az anyagok a hagyományos periódusos szerkezet nélküli szimmetriával bírnak. Dan Shechtman, a kvázikristályok felfedezője a nagy felbontású transzmissziós elektronmikroszkópiát (HRTEM) alkalmazta a szokatlan ötszörös forgásszimmetria és a kváziperiodikus szerkezet megfigyeléséhez, amely hagyományos röntgendiffrakcióval nem lett volna látható. Ez a technológia alapvető jelentőséggel bír a kvázikristályos struktúra azonosításában.

A topológiai anyagok és fázisátmenetek esetében olyan speciális körülmények között dolgoztak, ahol a kvantummechanikai topológiai tulajdonságok kiemelkedő szerepet játszanak, például a kétdimenziós rendszerekben, ahol az elektromos vezetőképesség stabil a zavarokkal szemben. Az ilyen anyagok felfedezéséhez olyan mérési és vizsgálati technikákra, mint a pásztázó alagútmikroszkópia (STM), és a szinkrotron-röntgenspektroszkópia volt szükség, amelyek nagy felbontásban mutatják meg az elektronok szokatlan eloszlását és a vezetési állapotok stabilitását.

A lítium-ion akkumulátorok fejlődése szintén példázza a technikai újítások fontosságát, mivel ezek az energiatároló rendszerek lehetővé tették az energiasűrűség és a hosszú élettartam optimalizálását. A lítium-ion akkumulátorok fejlesztéséhez speciális elektrokémiai analízis, a töltési és kisütési ciklusokat monitorozó rendsze-

rek, valamint a nedvességmentes tisztatér-technológia alkalmazása volt elengedhetetlen, mivel a lítium rendkívül érzékeny a nedvességre és egyéb szennyeződésekre.

A kvantumpöttyök fejlesztése során új, nanoméretű anyagokat hoztak létre, amelyek lehetővé teszik a fénykibocsátás színének finom szabályozását. Ez a kijelzők technológiájában és az orvosi képalkotásban rendkívüli perspektívával bír. A kvantumpöttyök előállításához nagy pontosságú, kontrollált növesztési eljárásokat, például kolloidális szintézist alkalmaztak, amely során az oldatban lévő nanorészecskék méretét és formáját precízen szabályozták, hogy a kívánt fénykibocsátási tulajdonságokat biztosítsák.

További közös vonás ezekben az anyagtudományi áttörésekben, hogy az új anyagok felhasználásával egyúttal új hasznos jelenségek is megvalósíthatók. Az invar ötvözet esetében például a hőtágulás hiánya tette lehetővé a precíziós mérőműszerek használatát (maga a jelenség pedig máig az elméleti kutatás tárgya). A kék LED-ek felfedezése az energiatakarékos fehér fényt kibocsátó LED-lámpák kifejlesztéséhez is elvezetett. A grafén kiemelkedő elektromos vezetőképessége és mechanikai szilárdsága új elektronikai eszközök számára nyitott utat, míg a kvázikristályok különleges szimmetriája és felületi szerkezete új típusú felületkezelési alkalmazásokat tett lehetővé. A topológiai anyagok, mint például a topológikus szigetelők, stabilan megőrzik vezetési tulajdonságaikat külső zavarok mellett is, ami fontos lehet a kvantumszámítógépek fejlesztésében. A lítium-ion akkumulátorok olyan lehetőséget nyújtottak az energiatárolás hatékonyságának növelésére, ami új energetikai megoldások kifejlesztéséhez is elvezethet, míg a kvantumpöttyök színvezérelhetősége új alkalmazások bevezetését is lehetővé teszi a kijelzőtechnológiában és a nanomedicinában.

Összességében az anyagtudományi újítások nemcsak új anyagokat, hanem technikai újításokat és fejlesztéseket is igényelnek, amelyek elérhetővé teszik ezeknek az anyagoknak a speciális tulajdonságait, és lehetővé teszik azok gyakorlati alkalmazását – olyanokat is, amelyek az alkalmazások eredeti spektrumát is kiszélesítik. Ezáltal az anyagtudományi kutatás jövője sok izgalmas lehetőséget tartogat. Az ipar számos területén fontos szerepet játszanak, sőt, alapját képezik további új anyagok fejlesztésének, amelyek ismét lehetővé teszik innovatív technológiák kifejlesztését és új termékek előállítását.

Az anyagtudomány központi szerepet játszik tehát a modern tudomány és technológia fejlődésében, mivel az anyagok szerkezetének és tulajdonságainak megértése alapvető fontosságú az új eszközök, gépek és technológiák kifejlesztéséhez. Az anyagtudomány az anyagok viselkedésének és tulajdonságainak mélyebb megismerésére törekszik, különösen a szerkezetük és összetételük szempontjából. Ez a tudományterület – mind elméleti és kísérleti szinten – szorosan összefonódik más természettudományokkal; különösen a fizikával, a kémiával és a biológiával, és alapvető fontosságú a mérnöki tudományokban is.

## Az anyagtudományi kutatások jelentősége és fókuszja

Az anyagtudományi kutatások középpontjában olyan kérdések állnak, mint a szilárdság, keménység, rugalmasság, elektromos és hővezetés, korrózióállóság, optikai tulajdonságok és egyéb olyan fizikai, kémiai jellemzők, amelyek meghatározzák az anyagok felhasználási lehetőségeit. Az anyagtudomány különböző típusú anyagokat – például fémeket, kerámiákat, polimereket, félvezetőket, kompozitokat és újabban nanoméretű anyagokat – vizsgál, és keres olyan új tulajdonságokat, amelyek innovatív alkalmazásokhoz vezethetnek.

A 21. század egyik legnagyobb kihívása a fenntartható anyaghasználat megvalósítása. Ez nemcsak az anyagok élettartamára és újrahasznosíthatóságára vonatkozik, hanem arra is, hogy csökkenteni kell az energiafelhasználást és a környezeti terhelést az anyagok előállítása és felhasználása során. Ennek érdekében az anyagtudományi kutatások jelentős része új, energiatakarékos technológiák, például a fentebb említett LED-es világítás fejlesztésére irányul, amelyek radikálisan csökkentik a globális energiaigényt és hozzájárulnak a fenntarthatóbb jövőhöz.

## Anyagtudomány és (véletlen) innováció

Az anyagtudományi kutatások jelentős hatást gyakorolnak az iparra és mindennapi életünkre, különösen akkor, ha a tudományos eredmények közvetlenül alkalmazhatók az ipari fejlesztésekben. Az innováció kulcsa a tudomány és ipar együttműködésében rejlik, hiszen az ipari partnerek versenyképes termékeket nyerhetnek az új felfedezésekből, míg a kutatók számára ez biztosítja eredményeik gyakorlati megvalósítását. A technológiatranszfer folyamatának révén az anyagtudományban elért eredmények gyorsan átültethetők az ipari gyakorlatba, felgyorsítva a fejlesztési folyamatokat és elősegítve a gazdasági növekedést vagy éppen a fenntarthatóságra való áttérést.

Az ipari problémák, kihívások megoldásához kapcsolódó kutatás-fejlesztési tevékenységek során gyakran keletkeznek „melléktermékek” is amelyek, annak farvizén jönnek létre, hogy a kutatásban a negatív eredmény is eredmény. Ezek a „sikertelen próbálkozások” később számos más területen, így a mindennapi életben is hasznosíthatók. Ezek a melléktermékek gyakran váratlan módon és nagy hatékonysággal tudnak új termékek vagy technológiák létrehozásához vezetni. Nézzünk néhány példát ezekre!

### 1. Neoprén – a szintetikus gumi kutatásának sikertelen kezdete

A 1930-as évek elején a DuPont vállalat kutatója, *Wallace Carothers* szintetikus gumi kifejlesztésén dolgo-

zott, mivel akkoriban nagy igény volt az olyan anyagok iránt, amelyek helyettesíthetik a természetes gumit az iparban. Bár az eredeti cél a gumipótlás volt, *Carothers* és csapata nem volt képes előállítani egy teljesen megfelelő szintetikus gumit. Ennek ellenére felfedezték a neoprén nevű anyagot, amely kiváló olajállóságot és hőállóságot mutatott, nem beszélve kiváló hőszigetelő tulajdonságairól (hővezetési együtthatója tipikusan  $0,05-0,065 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ ) [1].

### 2. Szuperragasztó – a műanyag irányzék fejlesztésének mellékterméke

Az 1940-es években *Harry Coover*, az Eastman Kodak kutatója átlátszó műanyag irányzékot akart létrehozni a második világháború során használt fegyverekhez. Kutatásai során egy olyan anyagot fejlesztett ki, amely rendkívül ragacsos volt, de nem tudta megvalósítani az eredeti célt, mert az anyag túlságosan tapadt, és ezzel nehezen kezelhetővé vált. Később, 1951-ben *Fred Joyner*, Coover kollégája felfedezte, hogy ez az anyag (cianoakrilát) különlegesen erős kötést biztosít, amelyet a legkülönfélébb anyagok ragasztására lehet használni. Így jött létre a szuperragasztó (pillanatragasztó), amelynek gyors kötése számos ipari, háztartási és orvosi alkalmazáshoz is ideális lett [2].

### 3. Teflon – a hűtőközeg-kutatás véletlen eredménye

1938-ban *Roy Plunkett*, a DuPont kutatója egy új, nem mérgező hűtőközeg kifejlesztésén dolgozott. Kísérletei során azonban véletlenül olyan anyagot hozott létre, amely rendkívül tapadásmentes volt, és nagy hőállóságot mutatott. Az új anyag, a politetrafluoretilén (PTFE) vagy más néven teflon nem volt használható a hűtőközegként, amire eredetileg tervezték, viszont a rendkívüli tapadásmentességét különféle alkalmazásokban kamatoztatták. Ma a teflon az edények, szigetelések, tömítések és számos ipari termék gyártásában elterjedt, különösen a tapadásmentes konyhai eszközöknél [3].

### 4. Post-it jegyzettömb – a gyenge ragasztó mint az erős mellékterméke

1968-ban a 3M vegyész, *Spencer Silver* egy erős ragasztó kifejlesztésén dolgozott, de az eredeti cél elérése helyett egy rendkívül gyenge kötésű ragasztót alkotott meg. Ezt az anyagot nem tartották hasznosnak, mert nem nyújtott tartós tapadást, ám évekkel később *Arthur Fry*, a 3M egy másik munkatársa felismerte, hogy a gyenge ragasztó ideális lehet könyvjelzők és jegyzetek rögzítéséhez. Így született meg a Post-it jegyzettömb, amely azóta számos irodai és háztartási alkalmazásban alapvető eszközzé vált [4].

## 5. Penicillin – a szennyezett minta mint orvosi áttörés

1928-ban *Alexander Fleming* baktériumok növekedésének tanulmányozása során felfedezte, hogy egy penészgomba (*Penicillium notatum*) elpusztítja a baktériumokat. Fleming eredetileg nem antibiotikumot keresett, csupán a baktériumkultúrák viselkedését figyelte. Felfedezése, amely nem volt szándékos, forradalmasította az orvostudományt, és a penicillin lett az első széles körben alkalmazott antibiotikum, amely rengeteg fertőző betegséget gyógyíthatóvá tett [5].

## 6. Lítium-ion akkumulátorok – az eredeti fejlesztési célt túlszárnyaló alkalmazások

A lítium-ion akkumulátorok fejlesztése során *John B. Goodenough*, *M. Stanley Whittingham* és *Akira Yoshino* kezdetben olyan energiatárolási megoldást kerestek, amely könnyebb és hosszabb élettartamú lehet, mint a hagyományos ólom-savas akkumulátorok. Bár eredetileg az elektromos autók és hordozható elektronikai eszközök számára fejlesztették, a lítium-ion technológia az energiatárolás számos új területén vált alapvetővé, beleértve a megújuló energiaforrások hálózati tárolását, valamint az űrkutatást és a katonai eszközöket [6].

## 7. Kevlár – erős gumi helyett páncélzat

1965-ben *Stephanie Kwolek*, a DuPont kutatója egy erős és könnyű gumialapú anyagot keresett az autógumik megerősítésére. Ehelyett olyan szintetikus rostot fedezett fel, amely sokkal erősebb volt, mint az acél, és ellenállt a szélsőséges hőmérsékletnek. Bár a kezdeti cél nem valósult meg, az új anyag, a kevlár végül golyóálló mellényekben, védőruházatokban és különféle ipari termékekben vált elterjedté, mivel kiváló védelmi tulajdonságokkal rendelkezik [7].

\*\*\*

Ezek csak néhány példát mutatnak arra, hogyan vezethetnek a kutatás-fejlesztés – különösen az anyagtudományi és anyagtechnológiai kutatás-fejlesztés – nem szándékos, nem várt eredményei jelentős innovációkhoz a mindennapi termékek és technológiák terén.

## A kutatás-fejlesztés mint az innovációba ágyazott kulcselem

Az anyagtudományi kutatás és fejlesztés alapja az interdiszciplináris szemléletmód – hiszen tudjuk, *a jelenségek legtöbbször a határfelületen játszódnak le* – és a rendszer szemlélet, valamint a nyitottság az újra és a szokatlanra. A kíváncsiság hajt bennünket előre: nem feltalálók, hanem inkább felismerők vagyunk, hiszen az anyagi világ törvényszerűségei mentén működik, és nekünk (tudósnak, mérnöknek) lehetőségünk nyílik pillanatnyi

bepillantást nyerni ezekbe a törvényekbe és felismerni azokat.

Ebben a kontextusban érvényes Kopernikusznak tulajdonított gondolat is, miszerint: „a tudomány rendre a hit birodalmába utazik az intuíció szárnyán – s onnan sosem tér vissza szuvenír nélkül”. Eme gondolat lényege, hogy a tudományos kutatás gyakran lépi át a megszokott határokat, és ismeretlen területekre merészkedik, ahonnan új ismeretekkel tér vissza. Ez rámutat arra, mennyire fontos a felfedezés, a felismerés szelleme és a nyitottság az új lehetőségek iránt.

Ez az út sokszor problémacentrikussággal indul, mint egy keresés, és a megadatott villanásnyi bepillantás eredményeképpen megfogalmazódik, formát ölt a koncepció, az ötlet. Sokszor ez a villanás egy tömörített „csomagként” érkezik, melyet eltart egy ideig kibontani. Innen az utunk gyakorlati része már a megoldáscentrikusság sávjába tér át az autópályán, amelyen határterületi szemléletmóddal és rendszerszemlélettel haladva a cél a megértés és a koncepció helyességének bizonyítása. Ezen az autópályán van, amikor lassítószárvba, van amikor gyorsítószárvba sorolunk vagy szorulunk.

Az innováció autópályáján haladva fontos felismerni, hogy a rendszerszemlélet kulcsszerepet játszik. A különböző rendszerek összekapcsolása újfajta komplexitást tár fel, ahol az egyedi komponensek nem csupán önmagukban, hanem az egész rendszer részeként értelmezendők. Ez a megközelítés különösen az anyagtudományban elengedhetetlen, ahol a cél az anyagok molekuláris szintű megértése és a belső szerkezetek tudatos tervezése. Az utóbbi évtizedekben a nanotudományok fejlődése lehetővé tette, hogy az anyagokat az atomok szintjén vizsgáljuk és módosítsuk, így teljesen új szerkezetek és tulajdonságok jelenhettek meg. Ez a tudományos áttörés alapvető szerepet játszott a különféle anyagtulajdonságok – például a szilárdság, vezetőképesség vagy hőállóság – új szintű manipulációjában és felismerésében (lásd pl.: aerogélek). Ezek azóta is egyre intenzívebben jutnak el arra a szintre, hogy ipari alkalmazásként jelenjenek meg. A különböző tudományterületek – például a kémia, fizika, biológia – találkozása gyakran új lehetőségeket teremt a problémák megoldására, hiszen egy-egy kutatás új perspektívából közelít egy problémához, és így válik képessé olyan megoldásokat találni, amelyeket korábban talán nem tartottak kivitelezhetőnek.

Ez a folyamat, amelyben a kutatás és fejlesztés időszakonként akár egymást is „beelőzi”, dinamikus és egymásra épülő. Van, amikor előbb kell fejleszteni, hogy utána kutatni lehessen. Ez a szépsége a határok nélküli innovációnak – az autópályán számos sáv és leágazás található, ahol a kutatók, mérnökök bátran mozoghatnak. Az anyagtudományi innováció tehát nemcsak egy új anyag vagy technológia megalkotásában nyilvánul meg, hanem abban, hogy a meglévő ismereteinket új módon alkalmazzuk, új lehetőségeket fedezünk fel, és folyamatosan kibővítjük a „sávokat”, ahol a jövő technológiai születhetnek. Mindehhez hozzátartozik az is, hogy

nem pusztán az anyagokkal, hanem az új gondolkodás-módokkal is dolgozunk, hiszen a valódi innováció lényege a folyamatos kérdezés, és az, hogy a megszokott határok mögé tekintve, eddig ismeretlen megoldásokat találjunk – ezáltal formálva az anyagtudomány jövőjét és az új ipari lehetőségeket.

Ahogy oktatóink, mentoraink tanították: „fontos, hogy jól kell kérdezni a természettől, hogy hajlandó legyen válaszolni”. Albert Einstein szavaival élve: „nem az a fontos, hogy mindent tudjunk, hanem az, hogy megértjük, hogyan kell kérdezni”. Az igazi tudományos kíváncsiság és a felismerések alapja a jól feltett kérdés, hiszen azok a kutatók és mérnökök is, akik képesek megfogalmazni a megfelelő kérdéseket, olyan válaszokat kapnak a természettől, amelyek végül az ismeretek határainak kitolásához vezetnek.

Cégünk alapításakor az innovációs lánc első szakaszára definiáltuk magunkat. Ez a szakasz az alap- és alkalmazott kutatás, valamint kísérleti fejlesztés. Ennek a végén jön létre a prototípus ami sokféle formát ölthet (anyag, összetétel, berendezés, műszer, módszertan, technológia stb). Technológiai készültségi szint (technology readiness level) tekintetében ekkor TRL1–TRL5-ről beszélünk a gyakorlatban [20]. Ezt a szakaszt jól jellemzi az előzőekben hivatkozott kopernikuszi gondolat.

Idővel, ahogy a különböző kutatás-fejlesztési eredmények megszületnek, az innováció felé mutató folyamatban több alapvető kérdés is felmerül. Hogyan lehet ezeket az eredményeket további forrásokkal támogat-

ni? Miként biztosítható a folyamatos fejlődés? Hogyan hasznosíthatók az elért eredmények, és kik lesznek képesek megérteni, illetve kinek kell továbbvinni azokat?

Ekkor lépünk egy másik gondolattal jellemezhető szakaszba, ami már a piaci tesztelés, validáció mellett a termék és technológia optimalizálásán keresztül igyekszik eljutni a gyártáshoz, a skálázáshoz és a piaci vonatkozásokhoz. Ennek alap gondolata Edisontól származik, miszerint: „a lángész egy százalék ihlet és 99 százalék verejték”. Ezzel a kijelentéssel Edison arra utalt, hogy a valódi eredmények eléréséhez sokkal fontosabb a kitartó munka és erőfeszítés, mint az egyszeri ötlet vagy ihlet. Milyen igaza volt! Ugyanis ez a szakasz még több erőforrást igényel, mint az addigiak. A tapasztalat alapján az idő is ilyen erőforrás, és ekkor derül ki sok esetben, hogy még a kompetenciák felülvizsgálata is szükségszerű, és annak határai vagy korlátai alapján szükséges kiegészíteni az addigiakat. Ide tartozik a tudományos és műszaki bizonytalanságok felmérése, értékelése; a kockázatelemzések és a SWOT-analízis. Ezek mind elengedhetetlen feltételei a sikeres út folytatásának a piacképes termékek és szolgáltatások felé.

Fontos megjegyezni, hogy a két szakasz határán található az innovációs szakzsargonban „halál völgynek” nevezett szakasz (TRL4–TRL6). Ennek egyik oka, hogy a kockázatok még magasak, de további források bevonása szükséges, és noha látszik a perspektíva, kevés külső szereplő vállalja a kockázatot. Másik ok, hogy ebben a

Technológiai fejlettségi szintek (TRL, Technology Readiness Levels)	TRL/IRL megvalósítási		Befektetési fejlettségi szintek (IRL, Investment Readiness Levels)
	tényező %	kockázat %	
9 A rendszer bizonyításra került, kereskedelmi bevezetésre készen áll: A rendszer megfelelő működése bizonyításra került, készen áll a teljes ipari léptékű kereskedelmi bevezetésre.	90–99%	1–5%	9 Kulcsfontosságú mérőszámok azonosítása és validálása: Az üzleti modell és a termék validálását követő fejlődés tervezése. A fontosabb metrikák azonosítása: tervezett eladás, bevétel, kiadás, közösségi média befolyása stb.
8 A rendszer beépítve a kereskedelmi tervezésbe: A rendszer/folyamat fejlesztése befejeződik, a tesztek és demonstrációkat követően minősítésre került (kereskedelmi forgalom előtti demonstráció).	75–90%	15–25%	8 Az üzleti modell bal oldalának validálása: Kulcsfontosságú partnerek/tevékenységek/erőforrások, költségvetés. (Ezen feladatok közül néhány már korábbi lépésekben befejezésre került.)
7 Integrált kísérleti rendszer demonstrálása: A komponens és/vagy folyamat demonstrálása releváns környezetben (integrált kísérleti rendszerszint).	60–75%	40–70%	7 Magas kidolgozottságú változat (MVP): Alaposabb validálás és magas kidolgozottságú termék szükséges, így maximalizálódik a befektetési készütség és a technológia fejlesztése is előrehalad.
6 A rendszer prototípusa elfogadásra kerül: A komponens és/vagy folyamat demonstrálása releváns környezetben (P-prototípus rendszerszint).	Kutatás és technológiai fejlesztés kockázati fedezeti pont		6 Az üzleti modell jobb oldalának validálása: Vásárlók, kapcsolatok, ügyfélszolgálatok, csatornák, bevételi források feltérképezése. (Ezen feladatok közül néhány már korábbi lépésekben befejezésre került.)
5 Laboratóriumi tesztelés az integrált/félig integrált rendszernek: A komponens és/vagy folyamat validálásra kerül releváns környezetben.	<25%	>90%	5 Termék piaci alkalmazása: Annak validálása, hogy a kidolgozott alatt lévő termék jelenti majd az adott probléma legjobb megoldását (UVP, unique value proposition).
4 Laboratóriumi tesztelés/a komponens vagy folyamat a-prototípusának validálása: A fejlesztés dizájnya és laboratóriumi tesztelése, ami útmutatásul szolgál, hogy a technológia a jövőben elérje-e a célkitűzéseket.	<3%	>97%	4 Alacsony kidolgozottságú változat: Kizárólag a bemutatáshoz szükséges funkcionalitással rendelkező termék létrehozása (MVP, minimum viable product).
3 A kritikus funkció vagy az elgondolás bizonyításra kerül: Az alkalmazott kutatás előrehalad, a fejlesztés korai szakaszba lép. A technológia egyes elemeinek tanulmányok és laboratóriumi mérések által történő validálása.	0–1%	100%	3 Probléma/megoldás validálása: A megoldandó probléma pontos körülírása, valamint annak validálása, hogy a fejlesztendő rendszer megoldást fog rá nyújtani.
2 Alkalmazott kutatás: Az elmélet alkalmazhatóságának kezdeti feltérképezése. A technológiai lehetőség egy probléma megoldására, igény kielégítésére megerősítésre kerül.	0–1%	100%	2 Piacutatás: A nyers, vázlatos üzleti modell megalkotását követő piacutatás. A piac telítettségének meghatározása, versenytárs elemzés.
1 Alapkutatás: Előzetes tudományos kutatás lett elvégzve. Az általános elvek kvalitatív megfogalmazása és megfigyelése. Ezen a ponton a figyelem még a felfedezésre összpontosul, nem az alkalmazhatóságra.	0–1%	100%	1 Előzetes vázlat: Az üzleti modell vázlatos körülírása. Ezen a ponton a feltételezések még nincsenek validálva.

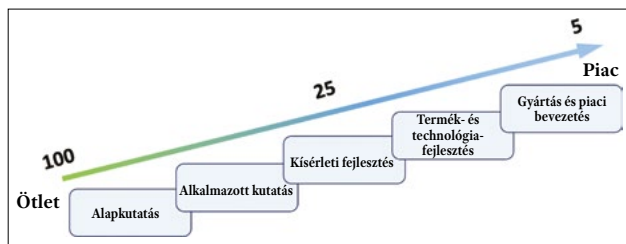
A TRL (más néven TRA, Technology Readiness Assessment) az Európai Bizottság C(2014)4995 számú döntésén és az Amerikai Egyesült Államoknak az 1980-as évek óta alkalmazott hivatalos módszerein alapul (NASA, DoD, ESA, Európai Bizottság H2020-ban 2014 óta, ISO 16290:2013 standard). Az IRL az OECD (Gazdasági Együttműködési és Fejlesztési Szervezet) és más nagy pénzügyi szervezetek módszerein alapul. Az IRL bizonyításon alapuló demonstráció a befektetőknek arról, hogy van egy megismételhető és méretezhető üzleti modell.

1. ábra. Technológiai és befektetési fejlettségi szintek

szakaszban derül ki a méretnövelés megvalósíthatósága, ami sok esetben negatív eredményt hoz. Itt már általában csak műszaki vagy technológiai bizonytalanság van. A TRL szintek mellett nagy szerepet kapnak ekkor a befektetésre való alkalmasságot mérő IRL (investment readiness level) szintek [21]– ezek együtt kezelve katalizálják a sikeres továbbhaladást. Az IRL szintek különös jelentőséget kapnak a befektetők szempontjából, mivel itt már bizonyítani kell, hogy a technológia nemcsak megvalósítható, hanem üzletileg is életképes modellként létezik, amely megismételhető és méretezhető.

Ahogy az 1. ábra is mutatja, a TRL és IRL szintek szervesen összefüggenek, hiszen nagyon kevés intézet, kutatóközpont és vállalkozás engedheti meg magának, hogy mindegyik szintet saját erőforrásból valósítsa meg. A különböző TRL és IRL szinteken más és más kompetenciák szükségesek: kezdetben inkább kutatói és fejlesztői erőforrásokra van szükség, míg későbbi IRL szinteken egyre nagyobb szerepet kap az üzleti modellezés és a piaci alkalmazhatóság vizsgálata, amelyek a megvalósítás során elengedhetlenné válnak.

Nagyon sok kiváló magyar példa van előttünk, ahol tudósok és mérnökök ezen az úton járva értek el és érnek el ma is eredményeket, legtöbbször megfizetve a tanulópénzt. Az innovációs lánc (2. ábra) általános ábrája a következő grafikon szemlélteti, hogy a nemzetközi átlag alapján 100 ötletből (TRL1) 25 jut el a prototípus szintjéig (TRL4–5). Viszont onnan a piacérett szintig (TRL9) már csak 5.



2. ábra. Az innovációs lánc

Az anyagtudományi és technológiai kockázatelemzések, SWOT-analízis, valamint a tudományos és műszaki bizonytalanságok feltérképezése éppen azért szükséges, mert ezekkel jelentősen növelhető a fenti átlag a gyakorlatban a kockázatok kiszűrése és menedzselése révén. Nagyon fontos megjegyezni, hogy az anyagtudományi és anyagtechnológiai kutatás-fejlesztések jellemzően hosszú inkubációs időt igényelnek, ami akár 10–15 év is lehet – éppen az alapkutatási vonatkozások és finanszírozási kihívások miatt. Azon projektek, amelyek sikeresen túljutnak ezeken a szakaszokon, kiemelkedő piaci potenciált hordoznak, hiszen a piacérett szint elérésekor a technológia már nemcsak stabilan működik, hanem kereskedelmi szempontból is életképes megoldásként léphet a piacra.

Az elmúlt évtizedben egyik oldalról saját eredményeinkhez kerestük az ipari alkalmazásokat, míg másik oldalról ipari problémákra kerestük a megoldást anyagtudományi és anyagtechnológiai szempontok szerint. Ezek

legtöbbször TRL1–TRL3 szintről indult. Az évek során több határterületen sikerült eredményt elérni egészen a TRL6–9 szintig egyedül vagy kooperációban. A teljesség igénye nélkül néhány példa:

- Általános kémiai labor és kisüzemi berendezések, technológiák
- 3D nyomtatott fémfelületek finomítási technológiája
- Nanopórusos alumínium-oxid szálás szigetelőanyag úripari alkalmazásokhoz
- Új generációs elektróda és fém-ion cellák
- Új generációs szuperötvezetek és alakadási technológia
- Új generációs hidrogén-előállítás és -tárolás

Az anyagtudományi és anyagtechnológiai kutatás-fejlesztés ipari oldalról való serkentése kiemelten fontos. A következőkben két olyan példával (ezek pont a TRL4–6 szakaszban vannak) illusztráljuk ezt. Az ipari fizikai szemlélet egy nagyon fontos külön világ, ahol továbbra is van relevanciája a kopernikuszi és az edisoni útnak egyaránt.

- Nagy entrópiás ötvözetek alkalmazása szerkezeti anyagként a mechanikai tulajdonságok optimalizálásával.
- Nagy entrópiás ötvözetek alkalmazása funkcionális termofeszültséges anyagként a hulladékhő hasznosítására magas hőmérsékleten. Ezen két téma egy-egy PhD-kutatás témája is, mely túlmutat a kutatási perspektíván és konkrét fejlesztési vonatkozásai vannak anyagtechnológiai oldalon is. Mindkét esetben ipari alkalmazhatósági szempontok inspirálták az indulást. A munkaterv komplex kísérlettervet tartalmaz, ami mentén haladunk (összetétel-tervezés, mintaelőállítás, mintapreparálás, additív technológiák, anyagvizsgálatok, mérések, kiértékelések stb.).

A tapasztalatok alapján a nagy entrópiájú ötvözetmin-ták között több olyan is van, melyek alakadása és megmunkálhatósága hagyományos módszerekkel lehetetlen, egyrészt a magas olvadáspont, másrészt a speciális mechanikai tulajdonságok miatt. Éppen ezért kutatás-fejlesztésünk során az alakadás módját a háromdimenziós fémnyomtatási eljárással valósítjuk meg.

## A nagy entrópiás ötvözetek fizikai tulajdonságai

Az ötvözés mindig is a tulajdonságok javításának az eszköze volt a fémek tudományában. Az alapcél az, hogy a megmunkálhatóság megőrzésével növeljük a szilárdságot. További igényként jelentkezik, hogy az ötvözet a nagy szilárdságot őrizze meg a lehető legmagasabb hőmérsékletekig (refraktori elemek – tűzálló elemek), és lehetőleg minél korrózióállóbb legyen.

A hagyományos ötvözetekkel szemben, amelyek egy domináns alapanyagból és kisebb arányú ötvözőkből állnak, a nagy entrópiás ötvözetek (high-entropy alloy)

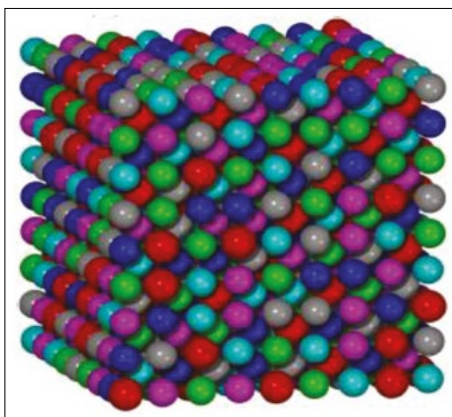
négy, öt, vagy akár több összetevőt tartalmaznak közel azonos atomszázalékban.

A HEA koncepcióját 2004-ben mutatta be két, egymástól független kutatócsoport, Jien-Wei Yeh és kutatócsoportja Tajvanon, illetve Brian Cantor és társai az Egyesült Királyságban. Yeh és munkatársai azzal a céllal dolgoztak, hogy radikálisan új, magas konfigurációs entrópiájú ötvözeteket hozzanak létre öt vagy több elem közel azonos arányú keverésével. Yeh koncepciójában a konfigurációs entrópia stabilizáló hatását hangsúlyozták, amely lehetővé tette, hogy az ötvözetek szilárd oldatként kristályosodjanak, és így elkerüljék az intermetallikus fázisok kialakulását.

Cantor és csapata ugyanakkor más megközelítést alkalmazott. Tömbi amorf ötvözetet szerettek volna előállítani az ún. összezavarodottság elvének (confusion principle [22]) a kihasználásával. Ezen elv szerint minél több komponens tartalmaz egy ötvözet, annál kisebb a valószínűsége a vegyületfázist adó kötéseknek, mert az adott elemnek annyi sok választási lehetősége van vegyületfázis képzésére, hogy összezavarodik, nem tud választani, így nem képez vegyületet. A sok lehetőség közepette még a lokális kristályszerkezetek sem alakulnak ki, így az ötvözet amorf marad, nem alakul ki sem a kémiai, sem a topológiai rend. Cantor 2004 júliusában az Oxfordban tartott XI. RQ anyagtudományi konferencián bemutatott poszterelőadásán beszámolt az ötvözesi kísérleteiről, melynek során egyre több fémet ötvözött egybe egyenlő mértékben. A legtöbb 20 fém összeolvasztása volt, mind egyikből 5-5 atomszázaléknyit véve. Tömbi amorft nem kapott, de a várt fázisok száma is csökkent.

A két megközelítés különbsége ellenére mindkét kutatócsoport ugyanarra a felismerésre jutott: a nagy entrópiás ötvözetek szerkezetükben gyakran lapcentrált köbös, tércentrált köbös vagy hexagonális szoros illeszkedésű rácsokat alkotnak, miközben az intermetallikus fázisok képződése minimális.

Annak ellenére, hogy ezek az ötvözetek topológiai rendezettséget mutatnak, kémiailag rendezetlenek maradnak (3. ábra), amely szerkezet alapját képezi olyan sajátos tulajdonságaiknak, mint a jelentős rácsdeformáció, lassú diffúzió és az úgynevezett koktéleffektus.



3. ábra. Kémiai rendezetlenség topológiailag rendezett rácsban

Ez a többkomponensű megközelítés lehetővé tette új típusú ötvözetek létrehozását, amelyek rendkívüli hőállósággal, mechanikai szilárdsággal és korrózióállósággal rendelkeznek. A sokösszetevős összetétel következménye, hogy lehetővé válik a kémiai összetétel folytonos „hangolása” is, mind az elemek fajtáját, mind koncentrációját illetően.

Az alapelgondolás négy fő tudatos pillére a következő:

- 1. Magas konfigurációs entrópia.** A több, közel azonos mennyiségű elem keveréke növeli a rendszer konfigurációs entrópiáját, ami termodinamikailag stabilizálja az egyfázisú szilárd oldatot, csökkentve az intermetallikus fázisok képződését.
- 2. Lassú diffúzió.** A sokféle atomféleség miatt az atomok diffúziója lelassul, ami növeli az anyagok magas hőmérsékleti stabilitását és tartósságát, különösen nagyon magas hőmérsékleteken.
- 3. Súrlódási hatás.** A különböző atomok eltérő méretei megakadályozzák a rács deformációját, ami nagyobb szilárdságot és keménységet eredményez.
- 4. Koktéleffektus.** A különböző elemek jelenléte különböző kölcsönhatásokat és tulajdonságokat eredményez, így az anyag mechanikai, hő- és korróziós ellenállása jelentősen javul.

A nem egyensúlyi, túltelített szilárd oldatot, vagyis a rendezetlenséget stabilizálhatja a konfigurációsentrópia-tag ( $\Delta S$ ) a Gibbs-féle szabadenergia kifejezésében ( $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ), mikor ott van mellette a rendeződésért felelős képződésentalpia-tag ( $\Delta H$ ), amelyik éppenséggel a szilárd oldatot akarja felszámolni vegyületfázisok létrehozásával, betartandó a Gibbs-féle fázisszabályt ( $F = C - P + 2$ ).

Az öt, egyenlő koncentrációban lévő ötvöző konfigurációs (keveredési) entrópiája  $\approx 1,6 R$ , ami átlagos 1200–1500 K-es olvadáspont esetén 16–20 kJ/mol energiával csökkenti a szabadenergiát, ami összemérhető a képződési hővel, így stabilizálhatja a szilárd oldatot.

- Az első feltétel tehát ehhez az, hogy az átlagos képződési entalpia legyen kicsi (kisebb mint 16 kJ/mol).
- A második feltétel az, hogy az atomi átmérők ne nagyon különbözzenek.

A túltelített szilárd oldatnak köszönhetően az ötvözet tele van atomi szintű belső feszültséggel, ami gátolja a diszlokációk mozgását, tehát a szilárdság nagy, ami párosul a plasztikus deformálhatósággal az egyszerű kristályos (FCC vagy BCC) szerkezetből adódóan.

A fémüvegekkel összehasonlítva a nagy entrópiás ötvözetek előnye, hogy rendelkeznek a kristályos ötvözetekre jellemző plasztikus deformálhatósággal, míg a tömbi fémüvegek általában ridegek és törékenyek. Ugyanakkor sokkal nagyobb a termikus stabilitásuk, mert a kiváló precipitáció hőmérséklete több száz fokkal haladja meg a fémüvegek kristályosodási hőmérsékletét. A fémüvegek kémiailag és topológiailag is rendezet-

lenek, míg a szilárd oldatú nagy entrópiás ötvöztek csak kémiaiailag rendezetlenek, topológiaiailag rendezettek, még ha torzultan is [8].

A témánk a nagy entrópiás ötvöztek különleges tulajdonságai, ezek tervezése, előállítás és alkalmazása. A továbbiakban csak a mechanikai tulajdonságokkal foglalkozunk, mert itt elsősorban strukturális alkalmazásokra gondolunk. Kutatási eredményeinkre példákat is hozunk, melyek célja a mechanikai tulajdonság becslése egyfázisú ötvöztek esetében.

Ezek a tulajdonságok kapcsolódnak a  $C_{ij}$  tenzorral jelölt rugalmas paraméterekhez, a  $B$ ,  $E$  és  $G$  betűkkel jelölt rugalmassági moduluszokhoz (tömbi, Young- és nyírási), valamint a  $\nu$ -vel jelölt Poisson-hányadoshoz.

A tulajdonságok másik fele a plasztikus deformációval kapcsolatos, mint a folyás-határfeszültség vagy a keménység. A deformációval kapcsolatos paraméterek elméletileg számíthatók (akár elsőelvű, azaz *ab initio* módon, lásd [13]), de ez komoly számítástechnikai felkészültséget és felszerelést igényel. Ezért az egyszerű ötvöztek mindennapos tervezéséhez egyszerű képleteket dolgoztunk ki, minimális bemenő adattal, melyek publikált táblázatokban megtalálhatóak (tabulált adatok: [www.knowledgedoor.com](http://www.knowledgedoor.com)).

A kohéziós energiával kezdjük, mert ez fejezi ki legjobban a kötések erősségét, a deformációval szembeni ellenállást. Csupán két paraméter felhasználásával:

$$E_C = 1,7 \text{ eV} \cdot \text{Å} (Z/R_m), \quad (1)$$

ahol  $R_m$  a fémes atomsugár ångströmben és  $Z$  a fémes vegyérték,  $E_C$  egysége az eV.

A kohéziós energia és az olvadáspont szoros kapcsolatban állnak, úgy hogy egymásra skalázhatók:

$$E_C = 0,24 \text{ (kJ/mol} \cdot \text{K)} T_m. \quad (2)$$

Kaptay George ezt az összefüggést korrigálta [9]:

$$E_C = 0,288 \text{ (kJ/mol} \cdot \text{K)} T_m, \quad (2')$$

ahol az  $E_C$  egysége a kJ/mol, és a hőmérséklet K-ben értendő.

A fenti összefüggésekből azt kapjuk, hogy a fémes vegyérték az olvadásponttal arányos:

$$Z = T_m / 500 \text{ K}. \quad (3)$$

Várható (és például az elsőelvű számításokkal is igazolható), hogy a (Vickers-) keménység is arányos a kohéziós energiával, hiszen mindketten a kötések erősségével arányosak:

$$\text{HV} = 0,37 \text{ (kp/mm}^2\text{)} \cdot \text{(mol} \cdot \text{cm}^3\text{/kJ)} E_C (Z/V_m), \quad (4)$$

ahol a kJ/mol-ban kifejezett kohéziós energiát osztjuk a  $\text{cm}^3$ -ben kifejezett moláris térfogattal, hogy megkapjuk a keménységet  $\text{kp/mm}^2$ -ben.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Az iparban dolgozók a  $\text{kp/mm}^2$  egységet használják a keménység számára, nem a fizikusok által preferált egységesített rendszert. (1 GPa = 100  $\text{kp/mm}^2$ ). Az elasztikus állandókat ( $B$ ,  $E$ ,  $G$ ) GPa-ban adjuk meg.

A nyírási moduluszt is sikerült meghatározni csupán két paraméter,  $Z$  és  $R_m$  segítségével:

$$G = 14 \text{ (GPa} \cdot \text{Å}^4) (Z/R_m^4). \quad (5)$$

Tiszta fémekre azt találtuk, hogy  $\text{HV} = 0,0617 G$ , de BCC egyfázisú, szilárdoldat-szerkezetű ötvöztekre figyelembe kellett venni  $G$  mellett az atomi átmérők  $\delta$  közepes eltérését is.

$$\text{HV} = 60 \text{ (kp/mm}^2\text{)} + 0,7 G \delta^{4/3}, \quad (6)$$

ahol az első tag az alkotóelemek keménységének súlyozott átlaga, a második tag pedig a szilárd oldat okozta keménységnövekedés, amiben  $\delta$  az atomi átmérők relatív szórásnégyzete. Ezen egyszerű képletek alapján megbecsülhető, hogy a tiszta fémek közül az ozmium a legkeményebb ( $\text{HV} = 3 \text{ GPa}$ ) a szilárdoldat-szerkezetű nagy entrópiás ötvöztek maximális keménysége pedig  $900 \text{ kp/mm}^2$ -re jön ki a (6) egyenlet alapján, ha a maximálisan megengedhető atomátmérő-eltérés  $\delta = 6,5\%$ , és az ötvözet átlagos nyírási modulusza  $G = 100 \text{ GPa}$ .

Ez egy jobbfajta szerszámacél keménységének felel meg. A magas hőállóságú nagy entrópiás ötvöztek alkalmazása mellett szól két tényező: a tulajdonságok tervezhetősége és a munkadarabok 3D nyomtatással való előállíthatósága.

A nagy entrópiás ötvöztek fizikai, s közte mechanikai tulajdonságainak gyors áttekintése után nézzünk néhány konkrét példát jelenlegi kutatás-fejlesztési fázisú alkalmazásokra!

- **Repülőgép- és űripár.** A *Rolls-Royce* nagy entrópiás ötvöztek alkalmaz a sugárhajtóművek és űreszközök olyan alkatrészeinél, amelyek extrém körülményeknek – például a magas hőmérsékletnek és oxidáló légkörnek – vannak kitéve. A nagy entrópiás ötvöztek, különösen a Cr-, Al-, és Ti-alapú ötvöztek kiváló hőállóságot, oxidációs ellenállást és mechanikai szilárdságot biztosítanak magas hőmérsékleten. Ez lehetővé teszi a hajtóművek és rakétarendszerek megbízhatóságának növelését és az élettartam meghosszabbítását, különösen a hiperszonikus és űrkutatási alkalmazásoknál, ahol a hagyományos ötvöztek nem elegendőek [10].
- **Energetika.** A *General Electric* kutatásaiban nagy entrópiás ötvöztek alkalmaznak a gázturbinák magas hőmérsékletű alkatrészeinek fejlesztésére. Ezeket az anyagokat a gázturbinák égési zónájában használják, ahol extrém hőmérsékletek mellett van szükség hosszú élettartamú, korrózióálló és magas hőállóságú anyagokra. A nagy entrópiás ötvöztek, különösen a Ni-, Fe-, és Co-alapú ötvöztek magas hőmérsékleten is stabilak, csökkentve az alkatrészek cseréjének gyakoriságát és javítva a turbina hatékonyságát [11].
- **Orvostechnikai alkalmazások.** Ezeket az teszi lehetővé, hogy az elasztikus moduluszok értéke olyan kicsire állítható be, ami összemérhető az emberi csont rugalmas moduluszának a értékével. Ez a mechanikai kompatibilitás elősegíti a biológiai kompatibilitást. Ha



egy korai átmeneti fémekből (Ti, Zr, Hf, V, Nb) álló összetétellel az összvegyértékszámot 4,2 környékére állítjuk be, akkor minimális, akár 20 GPa értékre is lecsökkenthető a nyírás modulus értéke. Ha ezenközben a szakítószilárdság értéke nem vagy csak kicsit változik, akkor ez azt jelenti, hogy a feszültség-deformáció görbe „lefektethető”, vagyis kitolható az elasztikus deformáció határa, ami elérheti az 1%-ot is. A fémüveg esetében ez 2%, míg deformálható anyagokra az elasztikus deformáció határát folyáshatárnak szokták nevezni, ami az acél esetében a közismert érték, 0,2%. A biológiai kompatibilitást elősegíti a Ti-tartalom, különösen ha nitrogénben hőkezelve egy titán-nitrid réteggel vonjuk be a munkadarabot [12].

Projektjeinkben a szerkezeti anyagként való felhasználás terén jelenleg az a nagy entrópiájú ötvözetek alkalmazásának fő célja, hogy sikerüljön például magasabb hőmérsékleten működő turbinalapátot, vagy a sugárzási károsodásnak ellenállóbb atomreaktor-tartályt készíteni, mint ami a jelenlegi tömbi megoldásokkal elérhető. A számítások szerint ahhoz hogy 1%-kal növeljük a jelenlegi turbinák hatásfokát, a turbinalapát működési hőmérsékletét 40 °C-kal kell növelni. A jelenlegi Ni-alapú szuperötvözetek a működési határukon vannak (1150 °C). Kiváltásuk előnyösebb ötvözetekre csak a magas olvadáspontú (tűzálló) fémek segítségével lehetséges. Ez kilenc fémeket jelent: Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo és W, melyek közül azonban mindegyik valamilyen „káros tulajdonsággal” rendelkezik. A Ti, Zr, Hf kristálytanilag nem stabil, 880 °C körül allotróp fázisváltozást mutatnak, ráadásul magas hőmérsékleten nagy mennyiségben oldják az oxigént (akár 28 atomszázalékos mennyiségben) – többet felvesznek, mint amennyit a víz magába old (8%). A wolfram már 800 °C-on oxidál, és az oxidja szublimál. A molibdén is oxidál és törékennyé válik. Egyedül a króm és valamennyire a tantál áll ellen az oxidációnak.

Cégünk feladatul tűzte ki egy nemcsak tűzálló, hanem az oxidációnak ellenálló ötvözet kifejlesztését. Az oxidációnak való ellenállás kialakításának egyik útja a „belülről kifelé” irányuló diffúzióval a minta felszínén létrehozott Al- és Cr-tartalmú védőoxid-réteg létrehozása. A másik út a „kívülről befele” történő cementálással vagy nitridálással létrehozott felületi karbid vagy nitrid védőréteg, ami impermeabilis az oxigén számára.

## A nagy entrópiás ötvözetek alkalmazása funkcionális termofeszültséges anyagként a hulladékhő hasznosítására magas hőmérsékleten

A világ energiatermelésének körülbelül 50%-a hulladék-hőként vész el a környezetbe. Ennek az energiának a megmentése és közvetlen átalakítása elektromos energiává nemcsak a hagyományos tüzelőanyagok felhasználását

csökkenti, hanem ezzel a CO<sub>2</sub>-kibocsátás mérsékléséhez is hozzájárul. A technológia alapját a Seebeck-effektus adja, amely lehetővé teszi a hő elektromos energiává való közvetlen alakítását mozgó alkatrészek nélkül.

A Seebeck-effektus során elektromos feszültség keletkezik egy vezető vagy félvezető anyag két vége között, ha azokat különböző hőmérsékletre hevítik. A hőmérséklet-különbség miatt a magasabb hőmérsékletű vég felől az alacsonyabb hőmérsékletű vég irányába elektronok (vagy egyéb töltéshordozók) áramlanak, ez hozza létre a feszültségkülönbséget. A feszültség nagyságát az anyag tulajdonságaitól függő Seebeck-koeficiens ( $S$ ) határozza meg, amelynek mértékegysége  $\mu\text{V}/\text{K}$  (mikrovolt per kelvin).

Az elnevezések tisztázása végett megemlítjük, hogy itt a felhasználás két fő területét a termofeszültség-jelenséget adó termoelektromos anyagok (TEM), valamint az ezen anyagokból készült termoelektromos generátorok (TEG) jelentik [14].

A TEM jellemzésére szolgál az úgynevezett jósági tényező, ami a hőmérséklettel besorozva egy dimenziómentes szám. A szorzat kívánatos nagysága 1 vagy 1-nél nagyobb [15]:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa} T = \frac{S^2}{\kappa \rho} T,$$

ahol

$S$  a Seebeck-koeficiens,

$\kappa$  a hővezetési tényező,

$\sigma$  az elektromos vezetőképesség,

$\rho$  a fajlagos elektromos ellenállás és

$T$  a hőmérséklet

A jósági tényező második alakját teljesítménytényezőnek is hívjuk:  $S^2/(\kappa\rho)$ .

A termoelektromos anyagból készült termoelektromos generátor energiakonverziós hatásfokát adja meg az úgynevezett hatékonysági tényező, ami már nem csak anyagi jellemző; függ az effektív fűtési ( $T_{\text{hot}}$ ) és hűtési ( $T_{\text{cold}}$ ) hőmérsékletektől, illetve ezek átlagától ( $T_{\text{avg}}$ ) is:

$$\eta = \frac{\Delta T}{T_{\text{hot}}} \cdot \frac{\sqrt{1 + ZT_{\text{avg}}} - 1}{\sqrt{1 + ZT_{\text{avg}}} + \frac{T_{\text{cold}}}{T_{\text{hot}}}}$$

A jósági tényező felső határát megkapjuk, ha csak az elektronok hővezetését vesszük figyelembe, és a rács hővezetését nullának vesszük. Ekkor [15]

$$L_0 T = \kappa/\sigma,$$

ahol  $L_0$  az elektronikus hővezetést leíró Lorentz- vagy Wiedemann–Franz-állandó [16]:

$$2,45 \cdot 10^{-8} \text{ V}^2/\text{K}^2,$$

és ezzel

$$ZT = S^2/L_0.$$

Az optimális  $ZT = 1$  értékhez  $S^2 = L_0$  tartozik, ahonnan származtatható a Seebeck-együttható alsó határa:

$$S = (L_0)^{1/2} = 157 \mu\text{V}/\text{K}.$$

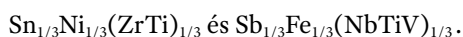
Ez egy szigorú követelmény a termoelektromossággal szemben, mert ha a rács hővezetőképességét is figyelembe vennénk, akkor még nagyobb  $S$  érték jönne ki.

A magas entrópiájú ötvözetek termoelektromos alkalmazásai az utóbbi években jelentős kutatási figyelmet kaptak [14–19]. Az alkalmazás fontos előnyei és hátrányai a következők.

- **Alkalmazási hőmérséklet.** A nagy entrópiás ötvözetek széles hőmérsékleti tartományban alkalmazhatók, gyakran akár 300 °C és 800 °C között. Ez a tulajdonságuk különösen alkalmassá teszi őket magas hőmérsékletű termoelektromos alkalmazásokra.
- **Jósaági tényező ( $ZT$ ).** A nagy entrópiás ötvözetek jósaági tényezője a kutatások szerint 0,8 és 1,5 között mozog a megadott hőmérsékleti tartományban. Ezek elméleti határok melyek felső értéke jelenleg lehetőség csupán.
- **Problémák.** Bár a ezek az anyagok ígéretesek a termoelektromos alkalmazásokban, több kihívással is szembesülnek, mint például a gyártási nehézségekkel. A többkomponensű összetétel miatt az ötvözetek előállítás bonyolult és költséges lehet. Egy másik nagyon fontos probléma a hővezetés. A magas hővezetési képesség csökkentheti a termoelektromos hatékonyságot, ezért a hővezetés optimalizálása kulcsfontosságú.

Példaként megemlíjtük, hogy egy kereskedelemben elérhető termoelektromos rendszer (nem HEA)  $ZT$  szorzata 0,8,  $\eta$ -ja pedig 5–6%. A hozzá tartozó termoelektromos anyag PbTe–PSb összetételű, aminek hátránya az alacsony olvadáspont és a rossz korrózióállóság.

Az alábbiakban saját munkatervünk alapján mutatjuk be az említett nehézségek megoldási lehetőségeit. A kulcs a 3D fémnyomtatás, amely új technológiaként lehetővé teszi, hogy olyan termoelektromos anyagból készítsük el a termoelektromos generátort, amely alkalmas 500–600 °C-os üzemi hőmérsékletű alkalmazásokra, és jósaági tényezője (a  $ZT$  szorzat) 0,8–1,0. Az optimális anyagot a nagy entrópiájú ötvözetek közül választottuk ki, amelynek összetétele:



A tervezéshez egy, az irodalomban már ismert összetételt használtuk, amelynek elektromos paraméterei adottak. A TEG készítése során egyedül a hővezetési tényezőt ( $\kappa$ ) tudjuk módosítani technológiai eszközökkel. Ennek érdekében a nyomtatás során speciális szerkezetet alakítunk ki az anyagban, amely növeli a hőszigetelési képességet, és ezzel csökkenti a hővezetési tényezőt. Ezzel az eljárással a két különböző összetételű komponens is összeolvaszthatjuk, így a többkomponensű összetétel kezelése sem jelent problémát.

A fémnyomtatók között a legelterjedtebbek az ún. poros nyomtatók, amelyek a síkban terített ötvözetport lézersugárral olvasztják össze, majd rétegről rétegre haladva építik fel a háromdimenziós testet. Ez a módszer

azonban nem felel meg számunkra, mivel itt nem biztosítható a különböző ötvözetek megfelelő elrendezésű és szerkezetű nyomtatása.

A másik, számunkra megfelelőbb nyomtatási módszer a filamentum, azaz szál alkalmazása – hasonlóan a műanyagnyomtatáshoz –, ahol az ötvözetport extrudálással előzetesen a szálba keverjük. A nyomtatott testet ezt követően szintereléssel hozzuk létre a kívánt hőmérsékleti és nyomásviszonyok között, így előállítva a tömbi ötvözetet. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy a termoelektromos generátor gyártása során a különböző típusú ötvözeteket az elvárásoknak megfelelően nyomtassuk. Ezen túlmenően ez a gyártási technológia biztosítja a hőállóságot is.

A hulladék hő termoelektromos generátorokkal történő hasznosítása a nagy entrópiájú ötvözetek egyik legígéretesebb ipari alkalmazása. Sokrétű felhasználása például kipufogócsövek, kemencék és egyéb magas hőmérsékleten működő rendszerek hővesztésegeinek csökkentésére nyújt megoldást.

## Jövőbeli irányok és összegzés

Az anyagtudomány fejlődése elengedhetetlen a modern ipar és technológia fenntarthatósága szempontjából. A kutatás-fejlesztés során szerzett ismeretek nemcsak az új anyagok tulajdonságainak megértéséhez vezetnek, hanem olyan ipari alkalmazások kialakításához is, amelyek növelhetik a termelési hatékonyságot, csökkenthetik a környezeti hatásokat, és hozzájárulhatnak az energiefelhasználás optimalizálásához. A nagy entrópiájú ötvözetek és a termoelektromos anyagok terén végzett kutatások például új lehetőségeket nyitnak a hulladék hő hasznosítására és az extrém környezetekhez igazított szerkezeti anyagok fejlesztésére.

Az anyagtudományban elért innovációk – a tudományos felfedezésektől kezdve az ipari alkalmazásokig – új utakat nyitnak a technológiai fejlődés számára. Az ipar és a tudomány együttműködése elengedhetetlen az új felfedezések gyakorlati megvalósításához és a fenntarthatóbb jövő felé vezető úton. Ehhez természetesen végig kell menni az úton szem előtt tartva azt a szemléletmódot, miszerint „rossz ötlet nincs, csak még jobb ötlet van”.

## Irodalom

1. Carothers W. (1931): Neoprene: A new synthetic rubber. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 23(12), 1412–1416.
2. Coover H., Joyner F. (1951): Cyanoacrylate adhesives and their properties. *Journal of Applied Polymer Science*, 5(1), 32–35.
3. Plunkett R. (1938): The discovery of PTFE (polytetrafluoroethylene). *DuPont Research Notes*, 10(4), 45–49.
4. Silver S., Fry A. (1968): A novel adhesive for temporary bonding applications. *Journal of 3M Materials Science*, 11(3), 219–223.
5. Fleming A. (1929): On the antibacterial effects of penicillin. *British Journal of Experimental Pathology*, 10(2), 226–236.
6. Goodenough J. B., Whittingham M. S., Yoshino A. (1980): Advances in lithium-ion battery technology. *Journal of Electrochemistry*, 25(7), 1564–1578.

7. Kwolek S. (1965): The development of Kevlar: A high-strength synthetic fiber. *DuPont Research Journal*, 15(1), 63–72.
8. Fuyang Tian, Lajos Karoly Varga, Levente Vitos (2017): Theoretical Design of Single Phase High-entropy Alloys. LAP Lambert Academic Publishing
9. Kaptay G. (2007): On the Equation Describing the Equilibrium Concentration of Vacancies as a Function of Temperature. *Materials Science Forum*, Vol. 537–538, pp. 503–508. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.537-538.503.
10. Gorsse S., Couzinie J.-P., Miracle D. B. (2020): From high-entropy alloys to high-entropy coatings and multi-principal element materials. *Scripta Materialia*, 187, 199–232. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2020.07.043.
11. Gao M., Zhang Y., Liaw P. K. (2013): High-entropy alloys for advanced turbine applications. *JOM*, 65(12), 1751–1760. DOI: 10.1007/s11837-013-0771-4.
12. Senkov O. N., Wilks G. B., Scott J. M., Miracle D. B. (2011): Mechanical properties of Nb<sub>25</sub>Mo<sub>25</sub>Ta<sub>25</sub>W<sub>25</sub> and V<sub>20</sub>Nb<sub>20</sub>Mo<sub>20</sub>Ta<sub>20</sub>W<sub>20</sub> refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, 19(5), 698–706.
13. Levente Vitos (2007): *Computational Quantum Mechanics for Materials Engineers: The EMTO Method and Applications*. Springer. ISBN: 978-3540688317
14. Zhang Y., et al. (2020): High-entropy alloys for advanced thermoelectric applications. *Materials Today Physics*, 15, 100255.
15. Liu Ruiheng et al. (2017): Entropy as a gene-like performance indicator promoting thermoelectric materials. *Advanced Materials*, 29(38), 1702712. <https://doi.org/10.1002/adma.201702712>
16. Wang S., et al. (2021): Thermoelectric properties of high-entropy alloys: A review. *Journal of Alloys and Compounds*, 872, 159712.
17. Doe J. (2022): Thermoelectric waste heat recovery in high-entropy alloys. *Journal of Applied Physics*, 134, 987–995. DOI: 10.1063/j.jap.2022.1340987
18. Smith A. B. (2021): Measurement of figure of merit in thermoelectric materials. *Material Science Reports*, 29, 456–467. DOI: 10.1016/j.matreprs.2021.029045
19. Brown C. (2023): Wiedemann-Franz law and applications in modern physics. *Physical Review*, D98, 112–125. DOI: 10.1103/PhysRevD.98.011112
20. Héder Mihály (2017): From NASA to EU: the evolution of the TRL scale in public sector. *The Innovation Journal*, 22, 1–23.
21. Innovation readiness level: <https://steveblank.com/2013/11/25/its-time-to-play-moneyball-the-investment-readiness-level/>
22. Greer A. L. (1993): Confusion by design. *Nature*, 366, 303–304. <https://doi.org/10.1038/366303a0>