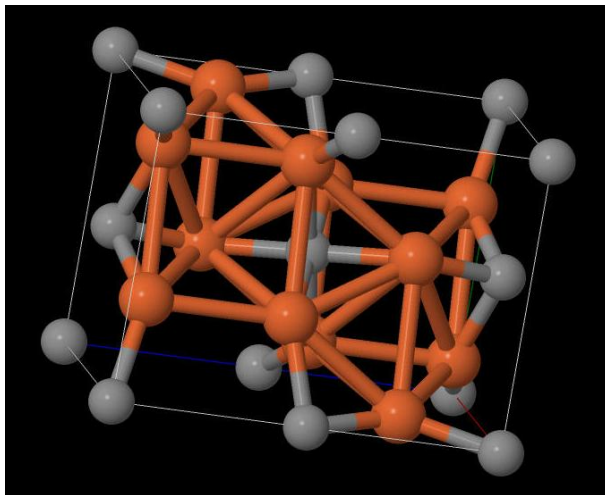


WATERSTOFTRAPPING IN STAAL: SITEBEPALING MET AB INITIO MODELLERING

Keywords: computationele materiaalkunde, staalonderzoek, waterstofverbrossing, DFT

In samenwerking met de vakgroep Toegepaste Materiaalwetenschappen en met OCAS – een joint venture tussen het Vlaams Gewest en ArcelorMittal, o.a. actief in R&D rond staal.



De eenheidscel van cementiet (een Fe₃C-allotroop)

Waterstof kan in de nabije toekomst uitgroeien tot een belangrijke energiedrager. Het ontwikkelen van de technologie die daarvoor nodig is, stelt onderzoekers voor talrijke uitdagingen. En veel van die uitdagingen zijn materiaalkundig van aard. Een ervan is de zogenaamde *waterstofverbrossing*, die optreedt in verschillende materialen waaronder staal: individuele waterstofatomen kunnen zich in het kristalrooster van het metaal nestelen, en zo de ductiliteit ervan negatief beïnvloeden. Ondanks het feit dat het fenomeen reeds lang gekend is, is het nog steeds niet begrepen en geeft waterstof nog steeds aanleiding tot ‘onvoorspelbare’ breuk – duidelijk te vermijden als het om bvb. een stalen waterstoftank gaat. Ook zonder rechtstreeks

gebruik van waterstof kan dit effect optreden, bvb. bij kathodische bescherming van pijpleidingen. Ook de hoogsterkstalen die nu al toegepast worden in de automobielindustrie vertonen een verhoogde gevoeligheid voor waterstofverbrossing, waardoor de performantie van de wagen gehypotekeerd kan worden. In deze gevallen vindt de ‘besmetting’ met waterstof tijdens de productie plaats (bvb. tijdens het lassen).

In Gent wordt, in samenwerking tussen OCAS (onderzoekscentrum ArcelorMittal) en de vakgroep Toegepaste Materiaalwetenschappen intensief onderzoek gedaan naar waterstofverbrossing van staal. Enerzijds onderzoekt men bijvoorbeeld het verband tussen staalsoort, waterstofconcentratie en mechanische eigenschappen door trekproeven uit te voeren op een veelheid van met waterstof behandelde staalsoorten. Anderzijds wordt de effectieve waterstofinhoud van staalsoorten gemeten, en kan er met thermische desorptiespectroscopie onderzocht worden welke bindingsenergieën de waterstofatomen in het staalrooster hebben met de verschillende defecten die in dat rooster aanwezig zijn.

Wat met deze macroscopische metingen nooit kan bepaald worden, is wat de precieze positie van de waterstofatomen op atomaire schaal is. Het is zelfs quasi onmogelijk dit via microscopische technieken te visualiseren. Zit het waterstofatoom bij voorkeur in een ijzerrijke zone, bindt het zich aan een koolstofatoom, zit het liever in een vacature, zoekt het dislocaties of korrelgrenzen op,...?

Met deze thesis gaan we net op zoek naar die atomaire resolutie, en wel door middel van kwantumfysische berekeningen.

Doelstelling

De bedoeling is om met bestaande computerpakketten de bindingsenergie van waterstof te berekenen op alle denkbare posities in een hele reeks typische kristalroosters: zuivere ijzerroosters zoals ferriet en austeniet, en dezelfde roosters met een fractie koolstof (martensiet, bainiet). Maar ook Fe-C-verbindingen zoals cementiet, grensvlakken tussen al deze fasen (bvb. austeniet/bainiet), defecten in deze materialen (vacatures, dislocaties) en eventueel zelfs precipitaten.

Door hetzelfde computationele model consequent toe te passen op al deze situaties, zullen we een goed beeld krijgen van de verwachte bindingsenergieën. Deze kunnen dan worden vergeleken met de beschikbare experimentele bindingsenergieën (in de literatuur is er nog veel discussie over de exacte waarden), waardoor we kunnen uitmaken of waterstof in de experimenteel onderzochte staalsoorten wel of niet in deze omgevingen voorkwam.

Dit onderzoek wordt uitgevoerd binnen het Centrum voor Moleculaire Modelling. Voorkennis van kwantumfysische computerpakketten is geen vereiste, geïnteresseerde studenten krijgen de nodige opleiding hieromtrent. De resultaten van de simulaties zullen in nauw overleg met OCAS en met de vakgroep Toegepaste Materiaalwetenschappen worden besproken.

Geïnteresseerde studenten hebben de kans om voorafgaand aan dit thesisonderzoek een stage bij OCAS in Zwijnaarde uit te voeren.

Promotoren: Prof. Dr. S. Cottenier – stefaan.cottenier@ugent.be (09/264.65.63), Prof. Dr. K. Verbeken kim.verbeken@ugent.be (09/331.04.53) / **Begeleiding:** Prof. Dr. S. Cottenier stefaan.cottenier@ugent.be (09/264.65.63) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>