



FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO DE UN ACERO 25Cr-20Ni: ESTUDIO COMPUTACIONAL

*S. Simonetti^{1,2†}, C. Lanz¹, G. Brizuela¹, A. Juan¹

¹ Universidad Nacional del Sur - CONICET, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina.

² Universidad Tecnológica Nacional, 11 de Abril 461, 8000 Bahía Blanca, Argentina.

[†]E-mail: ssimonet@uns.edu.ar

RESUMEN

La industria petroquímica ha utilizado el acero fundido del tipo Ni 25% Cr-20% en reformadores y hornos de pirolisis. El problema que se ha encontrado con estos materiales es su grave fragilización en servicio por defectos inherentes. El propósito de este estudio es contribuir al entendimiento del fenómeno de fragilización por hidrógeno por mecanismo de decohesión. Con el fin de estudiar el problema en detalle, se utilizan técnicas de simulación computacional.

Los átomos de hidrógeno se localizaron en la zona de la vacancia de la celda γ -55Fe-25Cr-20Ni. Las impurezas se alinearon a lo largo de la dirección [1 -1 0] y con la vacancia, en el plano (111). Este comportamiento está relacionado con la facilidad de formar un complejo lineal vacancia-hidrógenos, que podría actuar como un precursor en la iniciación de la grieta.

Se observa una transferencia de carga desde los átomos vecinos más cercanos de hierro, cromo y níquel a los átomos de hidrógeno. Este proceso de transferencia de electrones ayuda a formar los nuevos enlaces H-metal. Por otro lado, la fuerza de los enlaces metálicos vecinos disminuye. Los átomos de cromo tienen un papel importante en el proceso de fragilización, la población de solapamiento H-Cr es la más alta y los enlaces Cr-metal son los más afectados.

Es posible especular que el material puede fragilizarse por un efecto de presión si aparecen burbujas de hidrógeno molecular. Hemos encontrado una débil interacción H-H que podría estar asociada con el precursor de una burbuja de hidrógeno, pero no posee la naturaleza de un enlace químico como el de la molécula de H₂ en vacío.

Estos procesos pueden tener un rol clave en la posterior nucleación de la corrosión localizada tanto como en el inicio de la corrosión bajo tensión.

Palabras Claves: *fragilización, hidrógeno, acero, computacional*



IV CAIM 2014

Cuarto Congreso Argentino de Ingeniería Mecánica



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE
FACULTAD DE INGENIERÍA
Resistencia Chaco - Rep. Argentina

FORO
DOCENTE
DEL AREA
MECANICA
DE LAS
INGENIERIAS

FoDAMI

1. INTRODUCCIÓN

Desde hace tiempo se reconoce que la introducción de átomos de hidrógeno en aleaciones metálicas produce que el metal se transforme en quebradizo. La fragilidad se manifiesta a menudo por un aumento significativo de la rotura por tracción y la velocidad de endurecimiento por acritud y una reducción de la tensión a la rotura [1]. Debido a la importancia en ingeniería de este problema, una gran cantidad de investigaciones se han dedicado a la determinación de las condiciones en que se produce la fragilidad y en la cuantificación de sus efectos.

Se ha aplicado Dinámica Molecular y el método de átomo-embebido (EAM) al estudio de la fragilización intergranular por hidrógeno en las aleaciones de Ni-Cr-Fe. Las simulaciones sugieren que la susceptibilidad a la fragilización por hidrógeno está fuertemente ligada a la estructura de los bordes de grano. Los límites de grano, que poseen grandes huecos (voids) e irregularidades estructurales son afectados negativamente, mientras que los límites de grano que carecen de estos defectos son más resistentes a la fragilización [2].

El inicio de la corrosión bajo tensión (SCC) se estudió en aleaciones ternarias FCC Fe-Cr-Ni a 288 °C por medio de dinámica molecular química cuántica. Este análisis mostró que los átomos de hierro y cromo segregan más rápidamente a la superficie que los átomos de níquel. El hidrógeno difundido se carga negativamente mediante la adopción de electrones de los átomos metálicos. Por consiguiente, el proceso debilita los enlaces metálicos. Este tipo de proceso de reacción puede tener lugar en el dominio molecular de un extremo de la grieta y por lo tanto desempeña un papel fundamental en la iniciación del proceso de SCC [3].

Ide y col. observaron un pico de fricción interna debida al hidrógeno en aleaciones $Fe_{55}Cr_{45-x}Ni_x$ ($x=20-45$) y $Fe_{100-x}Ni_x$ ($x=35-100$). Estos autores emplearon un método de equilibrio gaseoso con el fin de cargar con hidrógeno las muestras de manera homogénea. En aleaciones $Fe_{55}Cr_{45-x}Ni_x$, la altura del pico incrementó significativamente a medida que se incrementaba el contenido de níquel, mientras que en aleaciones $Fe_{100-x}Ni_x$ la altura del pico no mostró un cambio monótono frente al contenido creciente de níquel. En ambas aleaciones la altura del pico dependía en gran medida de la composición de la aleación [4].

Yamamoto utilizando la técnica de trazado con isótopos observó que los huecos microscópicos inducidos artificialmente en aleaciones Fe-Cr-Ni capturaban tritio. De esta forma el autor confirma la llamada Teoría de la Presión, que es una de las teorías citadas en la falla de las aleaciones FeNiCr [5].

La industria petroquímica ha utilizado desde principios de 1960 el acero fundido del tipo Ni 25% Cr-20% (acero tipo HK) en reformadores y hornos de pirolisis. Esta clase de acero sustituyó a las súperaleaciones tradicionales con una reducción de los costos y tiene propiedades similares bajo



condiciones de creep, que es uno de los principales mecanismos de degradación que conducen a su falla en servicio a temperaturas elevadas. Posteriormente se llevaron a cabo varios estudios para evaluar los cambios de fase durante el servicio y la influencia de estos cambios en los mecanismos de falla por deslizamiento [6,7]. En los años 80 se desarrollaron las aleaciones HP (25Cr/35Ni), que fueron modificadas mediante el uso de ciertos metales como el molibdeno, niobio, tungsteno, titanio. El problema que se ha encontrado con estos materiales es su grave fragilización en servicio. Un factor que puede influir en la capacidad de servicio de los reformadores es la deficiencia en el material en términos de las propiedades mecánicas de sus tubos, por defectos inherentes [8]. Es bien conocido que los defectos tales como las vacancias, actúan como trampas para el hidrógeno [9], sin embargo, se sabe muy poco acerca de los mecanismos por los cuales se produce la fragilización.

Con el fin de estudiar el problema en detalle, es útil el uso de técnicas de simulación computacional, con ellas se pueden investigar los eventos en una escala mucho más detallada que con las que se pueden alcanzar mediante las técnicas experimentales disponibles en la actualidad. Así mismo la simplificación mediante un modelo permite analizar los aspectos relevantes de la complejidad real. El análisis del clúster ternario Fe-Cr-Ni mediante el estudio computacional puede proporcionar un nivel importante de entendimiento de la iniciación de la corrosión bajo tensión SCC. El propósito de este estudio computacional es investigar los procesos físicos y químicos en la etapa temprana de la iniciación de la fisura por corrosión bajo tensión (SCC) y así desarrollar un mejor entendimiento del fenómeno de fragilización por hidrógeno en aleaciones industriales $Fe_{55}Cr_{25}Ni_{20}$.

2. MÉTODO DE CÁLCULO Y MODELO

Se utilizó un cluster para simular una aleación de base de Fe, de tipo Ni 25% Cr-20%, con estructura sólida gamma [10], conteniendo 99 átomos de hierro, 45 átomos de Cr y 36 átomos de Ni distribuidos en cinco capas de planos de apilamiento (111). La geometría seleccionada para cada plano es un triángulo equilátero y el plano de referencia es el central, que contiene una vacancia. Los cálculos se realizaron con el método ASED-MO (superposición atómica y deslocalización electrónica del orbital molecular) [11-15]. Los valores de la energía adiabática total se calculan como la diferencia entre la energía electrónica (E) del sistema cuando el átomo H está a una distancia finita dentro del material y la misma energía que cuando el átomo está muy lejos de la superficie sólida. La "energía secuencial de absorción de hidrógeno" se puede expresar como:

$$\Delta E_{total} = E(FeCrNi + H_n) - E(FeCrNi + H_{n-1}) - E(H) \quad (1)$$



Donde n es el número de hidrógenos, con $n = 1$ o 2 .

El análisis de los resultados teóricos se realizó a partir de las curvas de energía de contorno, que cubren todo el plano (111) con pasos de 0.05 \AA . Después de determinar la posición más estable de los átomos de H en el interior del clúster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ se calculó la estructura electrónica. Se analizó el cambio en las poblaciones atómicas y los orbitales de los nuevos enlaces químicos. Para entender las interacciones entre los átomos se utilizó el concepto de curvas de solapamiento orbital cristalino (COOP).

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Mediante un sistema de absorción secuencial en el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$, fueron localizados dos átomos de hidrógenos. Las posiciones de menor energía corresponden a la zona próxima a la vacancia (V). La Figura 1 presenta una vista esquemática de la zona de adsorción de H. Las distancias mínimas de V-H son 1.34 \AA para H_I y 1.25 \AA para H_{II} . La Figura 2 muestra las curvas de nivel de energía correspondientes a la energía para el complejo vacancia-hidrógenos (VH_2). Podemos ver los átomos de H alineados a lo largo de la dirección $[1 \ -1 \ 0]$ y con la vacancia, en el plano (111). Este comportamiento puede estar relacionado con la facilidad de captura de hidrógeno, y por otra parte, la formación de una clusterización lineal vacancia-hidrogeno, como un precursor de la iniciación de grietas.

Tateyama y col. investigaron el efecto del hidrógeno en la clusterización de vacancias en BCC Fe [16]. Los complejos VH_2 tienden a favorecer a grupos de vacancias a lo largo de la dirección $\langle 111 \rangle$ y también a lo largo de de planos $\{110\}$ o $\{100\}$.

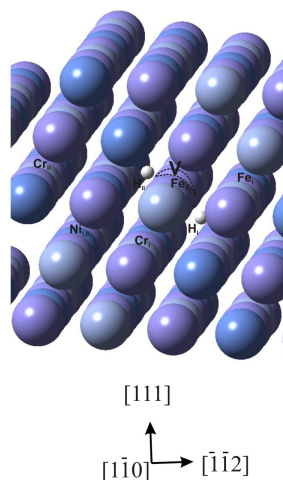


Figura 1. Vista esquemática de la localización del átomo de H en la zona de la vacancia en la aleación $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$.

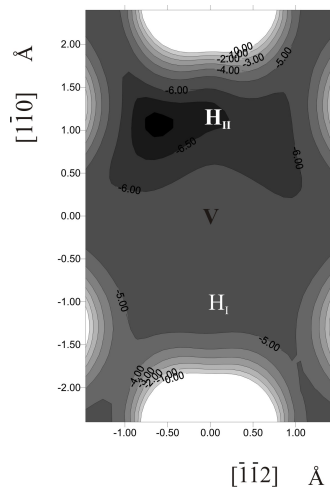


Figura 2. Curvas de nivel correspondientes a la energía (eV) para el sistema Fe-Cr-Ni -H-H en la zona de la vacancia (V).

Los autores señalan las consecuencias en los fenómenos de fragilización por H que tienen las actividades de vacancias de hidrógeno. Los grupos $\{110\}$ en el cluster son la primera evidencia teórica razonable de la evolución de fisuras observadas experimentalmente a lo largo de los planos de deslizamiento de metales BCC. En un estudio anterior, hemos demostrado que el complejo VH_4 es probable que favorezca a las agrupaciones a lo largo de la línea de dirección $[-1 -1 2]$ en el plano (111) de la aleación FCC de Fe-Ni [17]. Estos patrones repetitivos muestran que la clusterización vacancia-hidrógeno puede tener un efecto significativo en la iniciación de una grieta. La Figura 3 (a) muestra la gráfica de densidades de estados (DOS) correspondiente para el cluster aislado $Fe_{55}Cr_{25}Ni_{20}$. Los estados d de la aleación forman una banda a partir de -14 eV y con un ancho de banda de 8 eV, mientras que los estados s y p están dispersos y penetran en la banda d. La Figura 3 (b) muestra el cluster $Fe_{55}Cr_{25}Ni_{20}$ después de la ubicación de los átomos de H. Podemos ver la posición de los estados del H después de la adsorción. La pequeña contribución del H a la DOS se debe a su baja concentración. Una vista ampliada de estados del H se puede ver en la Figura 3 (c). El H proyectado en la gráfica DOS muestra al H situado profundamente en estados con valores más bajos de energía que confirman la favorable interacción vacancia-hidrógeno. La energía de Fermi (E_f) es -8.22 eV y cambia ligeramente con respecto al cluster aislado. El átomo H_I (H_{II}) se encuentra localizado cerca de átomos de Fe, Ni y Cr a distancias de 2.22 Å, 2.95 Å y 1.62 Å (2.28 Å, 2.78 Å y 1.56 Å, respectivamente). Como consecuencia de esto se forman las interacciones H-Fe, H-Ni y H-Cr.

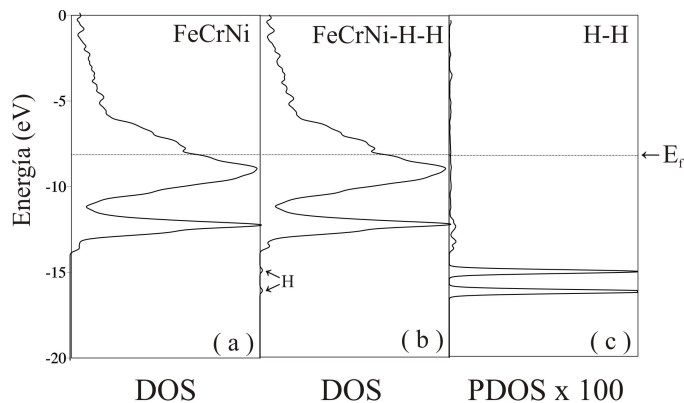


Figura 3. (a) DOS total para el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ aislado, (b) DOS total para cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ -H-H y (c) DOS proyectada para los átomos de H en el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ -H-H.

Las poblaciones de solapamiento (OPs) de la interacción H-Fe son 0.082 (para $\text{H}_I\text{-Fe}_I$) y 0.053 (para $\text{H}_{II}\text{-Fe}_{II}$), mientras que las OPs H-Ni son 0,012 (para $\text{H}_I\text{-Ni}_{I, II}$) y 0.027 (para $\text{H}_{II}\text{-Ni}_{I, II}$); finalmente, las OPs H-Cr son 0.297 (para $\text{H}_I\text{-Cr}_I$) y 0.348 (para $\text{H}_{II}\text{-Cr}_{II}$), respectivamente (las referencias de la numeración de los átomos se muestra en la Figura 1). Las curvas COOP para las interacciones H-metal se muestran en la Figura 4. Como puede observarse, las interacciones H-metal son principalmente enlazantes y la mayor OP H-metal corresponde a la interacción H-Cr ($\text{H-Cr} > \text{H-Fe} > \text{H-Ni}$).

El hidrógeno induce cambios locales en los estados electrónicos de la aleación $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ debido a las diferentes afinidades con los componentes metálicos. Las ocupaciones de los orbitales atómicos metálicos, vecinos más cercanos a los átomos del H, se modifican después de la adsorción, estas densidades electrónicas se resumen en la Tabla 1. Para los átomos vecinos de Fe, los cambios más importantes se observan en el orbital Fe $4p_x$ cuya población disminuye cerca del 26%, cuando el H está presente. La contribución de la población Fe $4s$ disminuye aproximadamente un 5%, mientras que las poblaciones Fe $4p_y$, $4p_z$ y $3d_{x^2-y^2}$ disminuyen entre 2-4%. Para los átomos vecinos de Cr, los cambios más importantes se observan en los orbitales Cr $4s$, $4p_y$, $4p_z$ cuyas poblaciones disminuyen aproximadamente un 13%, y aumentan entre 39% y 18% respectivamente, cuando el H se adsorbe. La población Cr $3d_{x^2-y^2}$ aumenta aproximadamente un 11%, mientras que las poblaciones Cr $3d_{z^2}$ y $3d_{xz}$ crecen alrededor del 7%.

En el caso de los vecinos de Ni más cercanos a los átomos de H, la población de Ni $4p_z$ disminuye aproximadamente un 7%. La contribución del resto de las poblaciones orbitales del Ni disminuyen menos del 3%.

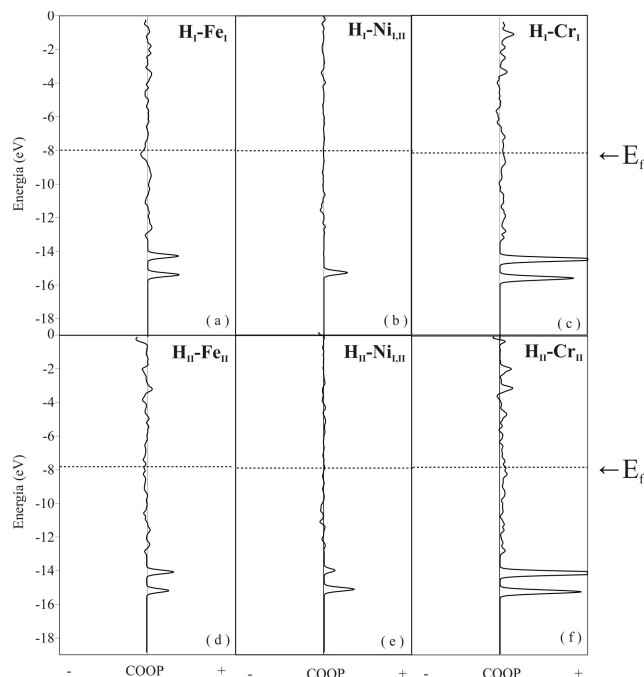


Figura 4. Curvas COOP para las interacciones H-metal en el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ -H-H.

Los resultados indican una participación mayoritaria de orbitales del Cr y del Fe en los enlaces hidrógenos-aleación. El análisis de población Mulliken muestra una carga parcial negativa sobre los átomos de H mientras que se localiza la carga positiva en las cercanías de los átomos vecinos de Fe, Cr y Ni, lo que indica una transferencia de electrones al átomo de H desde los átomos metálicos vecinos más cercanos. Se observa que la transferencia de electrones más importante corresponde a los átomos de Fe vecinos más cercanos. El proceso de transferencia de electrones ayuda a formar los nuevos enlaces H-metal. Como se ha indicado en los párrafos anteriores, los grupos vacancias-hidrogeno se presentan como un precursor de la iniciación de la grieta. Las reacciones de H-metal, pueden tener lugar en el dominio de un extremo de la fisura y por lo tanto actuar como componente fundamental en la iniciación del proceso de corrosión bajo tensión (SCC). La fuerza de los enlaces metálicos se modifica después de la ubicación del H. Los enlaces Fe-Ni, Cr-Fe, Cr-Ni, Fe-Fe, Cr-Cr y Ni-Ni, vecinos más cercanos a los átomos de H están afectados, sus OP disminuyen 0.4%, 25%, 11%, 3%, 28 % y 0,1%, respectivamente. Como podemos ver, los enlaces vecinos Cr-Cr, Cr-Fe y Cr-Ni son los más afectados después de la adsorción del H. La Figura 5 muestra las interacciones Cr-metal, antes y después de la adsorción de H. Se observa una disminución de la OP que está asociada con el debilitamiento del enlace metálico.



IV CAIM 2014

Cuarto Congreso Argentino de Ingeniería Mecánica



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE
FACULTAD DE INGENIERÍA
Resistencia Chaco - Rep. Argentina

FORO
DOCENTE
DEL AREA
MECANICA
DE LAS
INGENIERIAS

FoDAMI

Tabla 1. Ocupación orbital electrónica de los átomos que participan en las interacciones

Atomo	s	p _x	p _y	p _z	d _{x²-y²}	d _{z²}	d _{xy}	d _{xz}	d _{yz}
H _I	1.3588 ^a								
H _{II}	1.3627 ^a								
Fe _I	0.6565 0.6922	0.0595 0.0808	0.0766 0.0779	0.0748 0.0765	1.3054 1.3659	1.3261 1.3390	1.4035 1.3952	1.3187 1.3464	1.2532 ^a 1.2655 ^b
Fe _{II}	0.6614 0.6972	0.0633 0.0856	0.0732 0.0749	0.0798 0.0823	1.3482 1.3869	1.3264 1.3416	1.3933 1.3838	1.3640 1.3617	1.2739 ^a 1.2815 ^b
Cr _I	0.5090 0.5784	0.0668 0.0662	0.0534 0.0520	0.0753 0.0637	0.5410 0.5448	0.6829 0.7271	0.6916 0.6919	0.5959 0.5576	0.5633 ^a 0.5448 ^b
Cr _{II}	0.4986 0.5739	0.0602 0.0600	0.0739 0.0530	0.0496 0.0453	0.5551 0.4969	0.6639 0.6595	0.7199 0.7235	0.5331 0.5355	0.4987 ^a 0.5256 ^b
Ni _{I,II}	0.9465 0.9621	0.3757 0.3795	0.3726 0.3822	0.3503 0.3764	1.8834 1.8836	1.8780 1.8747	1.8912 1.8878	1.9253 1.9257	1.9224 ^a 1.9197 ^b

^a después de la localización del átomo de H

^b antes de la localización del átomo de H

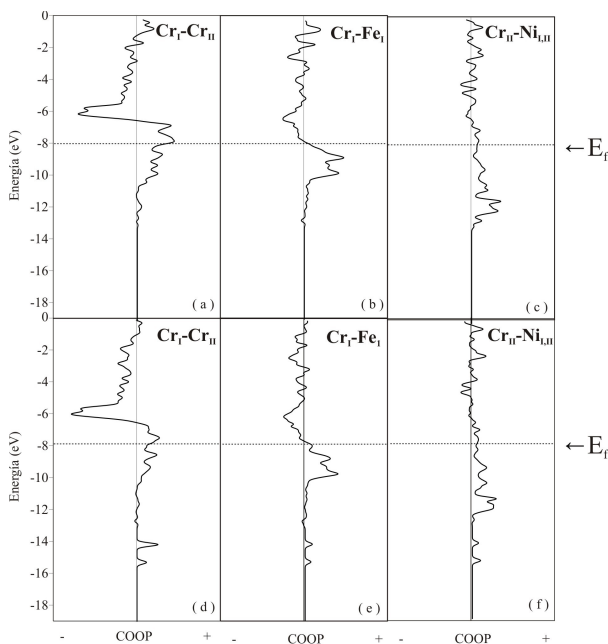


Figura 5. Curvas COOP para la interacción Cr-Cr,(a) antes y (d) después de la adsorción de H. Curvas COOP para la interacción Cr-Fe,(b) antes y (e) después de la adsorción de H. Curvas COOP para la interacción Cr-Ni,(c) antes y (f) después de la adsorción de H.



IV CAIM 2014

Cuarto Congreso Argentino de Ingeniería Mecánica



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE
FACULTAD DE INGENIERÍA
Resistencia Chaco - Rep. Argentina

FORO
DOCENTE
DEL AREA
MECANICA
DE LAS
INGENIERIAS

FoDAMI

El mecanismo de fragilización se potencia al formarse enlaces entre los metales y los átomos de H; y debilitando los enlaces metal-metal hasta su eventual ruptura. Este proceso juega un papel importante en la posterior nucleación de la corrosión localizada.

A partir del presente estudio, se puede concluir que los átomos de Cr tienen un papel importante en las interacciones de H-metal debido a la OP más alta para la interacción H-Cr y, por otro lado, los enlaces Cr-metal son los más afectados después de la adsorción de H.

Se ha reportado en la literatura que la adición de hidrógeno tiene un marcado efecto en las propiedades mecánicas de las aleaciones de alto contenido de Cr [18]. El cromo puede tener dos efectos: 1) puede aumentar la tensión requerida para iniciar huecos, y 2) puede aumentar la tensión requerida para coalescer los huecos. Dado que la deformación de falla es mucho mayor en las aleaciones de alto contenido de Cr, parece que la nucleación de microporos y/o procesos de crecimiento se presenta en las altas deformaciones con el aumento del contenido de cromo. Se observó un máximo en la fragilización con un contenido de Cr superior al 25%, donde se redujo el alargamiento del 53% al 14%. Un aumento en la tensión de fluencia incrementó el esfuerzo local y permitió la decohesión a una deformación más baja. Esto es consistente con el cambio en el comportamiento de endurecimiento por deformación observada en estas aleaciones como una función de la concentración de cromo [18]. El aumento del contenido de cromo de la aleación aumentó la solubilidad del hidrógeno en los contenidos superiores al 15% de cromo. Los ensayos que se realizaron para determinar el porcentaje de reducción en el área de aleaciones de 6% y 15% de Cr con la misma concentración de hidrógeno, mostraron que la aleación con 15% de Cr se fragiliza más [18].

Los efectos de fragilización por hidrógeno pueden observarse como el desarrollo de la iniciación y/o la propagación de grietas con daños por el hidrógeno inducido, tales como ampollas superficiales y grietas o huecos internos [19]. Es posible especular que cualquier material puede fragilizarse por un efecto de presión si aparecen burbujas de hidrógeno molecular y este estado se mantiene sin cambios hasta la fuga de las burbujas [20]. En este estudio, se evidencia cierta asociación H-H en el cluster $Fe_{55}Cr_{25}Ni_{20}$. La curva COOP correspondiente a las interacciones H-H se muestra en la Figura 6. Esta curva presenta picos enlazantes y antienlazantes por debajo de E_f . La integración hasta el nivel de Fermi da la OP total para la unión H-H en el cluster. Podemos indicar que la interacción H-H ocurre a una distancia de 2.59 Å con un valor de OP de 0.004. De acuerdo con la literatura, un enlace químico típico para H_2 molecular ocurre a una distancia interatómica de 0.74 Å.

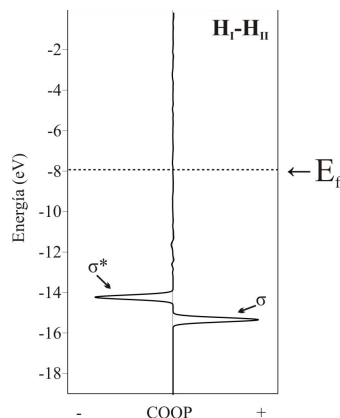


Figura 6. Curvas COOP para la interacción H-H en el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ -H-H

Dentro de la aproximación ASED-MO en el vacío, la OP H-H a la distancia de 0.74 Å es de 0.15. Como podemos ver, la distancia H-H en el cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ es mucho más grande y la OP es más pequeña que el correspondiente a la molécula de H_2 en el vacío. Así se concluye que la formación de un enlace de H-H no se evidencia dentro de la vacancia de H con los componentes metálicos del cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$.

4. CONCLUSIONES

Los cálculos teóricos contribuyen a interpretar los cambios en la estructura electrónica del cluster $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$ y la unión química después de la adsorción de H para un mejor entendimiento del fenómeno fragilización por H por mecanismo de decohesión de las aleaciones de hierro-cromo-níquel.

Los átomos de H están atrapados en la zona de la vacancia del cluster γ - $\text{Fe}_{55}\text{Cr}_{25}\text{Ni}_{20}$. Las impurezas están situadas y alineadas a lo largo de la dirección [1 -1 0] y con la vacancia, en el plano (111). Este comportamiento puede estar relacionado con la facilidad de atrapar hidrógeno y formar un complejo lineal vacancia-hidrógenos, y ser un precursor en la iniciación de la grieta.

Se observa una transferencia de carga a los átomos de H desde los átomos vecinos más cercanos de Fe, Cr y Ni. El proceso de transferencia de electrones ayuda a formar los nuevos enlaces H-metal. La ocupación de los orbitales atómicos de los enlaces metálicos cercanos a los átomos de H se ven afectadas. Los cambios se presentan principalmente en los orbitales Cr $4p_y$ y Fe $4p_x$. Los orbitales metálicos $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{z^2}$ y $3d_{xz}$ tienen también participación en las interacciones hidrógeno-metal.

La fuerza de los enlaces metálicos vecinos más próximos a los átomos de H disminuye.



IV CAIM 2014

Cuarto Congreso Argentino de Ingeniería Mecánica



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE
FACULTAD DE INGENIERÍA
Resistencia Chaco - Rep. Argentina

FORO
DOCENTE
DEL AREA
MECANICA
DE LAS
INGENIERIAS

FoDAMI

Los átomos de Cr tienen un papel importante en el proceso de fragilización, la OP H-Cr es la más alta y los enlaces Cr-metal son los más afectados después de la adsorción de H.

Hemos encontrado una débil interacción H-H que podría estar asociada con el precursor de una burbuja de hidrógeno pero que está muy lejos de tener la naturaleza de un enlace químico en la molécula de H₂ en vacío.

El mecanismo de fragilización se potencia al formarse enlaces entre los metales y los átomos de H, lo que debilita los enlaces de metal-metal.

Todos estos procesos pueden tener un rol clave en la posterior nucleación de la corrosión localizada como en el inicio de la corrosión bajo tensión.

5. REFERENCIAS

- [1] T. Boniszewski, G. C. Smith, Acta Metall. 11,165, 1963.
- [2] R. W. Smith, G. S. Was, Phys. Rev. B 40,322, 1989.
- [3] N. K. Das, K. Suzuki, K. Ogawa, T. Shoji, Corros. Sci. 51,908, 2009.
- [4] N. Ide, T. Naito, S. Asano, Jpn. J. Appl. Phys. 44,8088, 2005.
- [5] S. Yamamoto, Mater. Trans. 45,2647, 2004.
- [6] L. H. de Almeida, A. Freitas Ribeiro, I. Le May, Mater. Charact. 49,219, 2003.
- [7] N. Sukumaran, Hydrocarbon Processing 80, 1, 2001.
- [8] A. K. Ray, S. K. Sinha, Y. N. Tiwari, J. Swaminathan, G. Das, S. Chaudhuri, R. Singh, Eng. Fail. Anal. 10,351, 2003.
- [9] S. Simonetti, C. Pistonesi, G. Brizuela, A. Juan, J. Phys. Chem. Solids. 66, 1240, 2005.
- [10] J. Tomiska, J. Alloy Compd. 379,176, 2004.
- [11] R. Hoffmann, W. N. Lipscom, J. Chem. Phys. 36,2179, 1962.
- [12] R. Hoffmann, J. Chem. Phys. 39, 1397, 1963.
- [13] M. H. Whangbo, J. Amer. Chem. Soc. 100, 6093, 1978.
- [14] A. B. Anderson, J. Chem. Phys. 62, 1187, 1975.
- [15] G. Landrum, W. Glassey, Yet Another Extended Huckel Molecular Orbital Package (YAeHMOP) Cornell University, Ithaca, NY, 2004.
- [16] Y. Tateyama, T. Ohno, Phys. Rev. B. 67,174105, 2003.
- [17] S. Simonetti, G. Brizuela, A. Juan, Molecular Physics 108,79, 2010.
- [18] D.M. Symons, Metall Mater Trans 28A, 655,1997.
- [19] I.M. Bernstein, A.W. Thompson, Hydrogen Embrittlement of Steels, Encyclopedia of Materials Science and Engineering, M.B. Bever, Editor, Pergamon Press, 2241, 1988.
- [20] S. Nakahara, Y. Okinaka, Acta Metall., 31,713, 1983.