

MmeMss07-001

Estudos fundamentais do coeficiente de difusão de H₂ em cristais metálicos por dinâmica molecular

Lucena, S.(1); De Oliveira, J.A.(1); Sydriao, V.(1); Silveira Castro, A.L.(1);
(1) UFC;

O efeito do hidrogênio em materiais metálicos é conhecido da literatura há vários anos. Numerosos materiais metálicos como aço ferrítico, aço inoxidável austenítico, ligas a base de níquel, ligas de alumínio e ligas de titânio estão sujeitas ao processo de fragilização. Componentes estruturais importantes na cadeia de hidrogênio são feitos destes materiais e desta forma estão sujeitos a fragilização podendo causar vazamentos de H₂ e acidentes catastróficos. Central ao processo de fragilização, está o mecanismo de difusão de H₂ e o subsequente impacto nas propriedades elásticas do material. A liga metálica real apresenta vários defeitos que conjuntamente com o H₂ podem potencializar a degradação do material. Neste estudo, usamos os métodos de dinâmica molecular para eliminar os efeitos complicadores da inter-relação dos defeitos com o hidrogênio, e avaliamos qual o impacto do H₂ na matriz metálica livre de impurezas. Ao contrário dos métodos experimentais, as simulações de dinâmica molecular podem simular cristais perfeitos enquanto se controla a concentração exata de hidrogênio na rede. Depois de quantificado o papel de hidrogênio no reticulado, livre de defeitos, pode-se estender o estudo para englobar as diferentes classes de imperfeições (fissuras, vazios, impurezas e contornos de grão). Testamos um campo de força clássico e campos de força reativos (Reaxff) na avaliação da difusividade e resistência mecânica para diferentes concentrações de H₂ em reticulados de Fe (alfa), Fe₃C e Ni. As difusividades do ferro alfa medidas com os dois campos de força deram diferenças de uma ordem de grandeza enquanto os valores de resistência mecânica foram similares. Todos os materiais apresentaram redução na resistência mecânica à medida que as porcentagens de H₂ no reticulado aumentavam de 0 até 5%. Diferenças individuais do comportamento do H₂ nas diferentes fases são também discutidos.