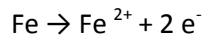


MODELLEREN VAN CORROSIE OP ATOMAIR NIVEAU: DE ROL VAN OPPERVLAKKEN IN KOPER

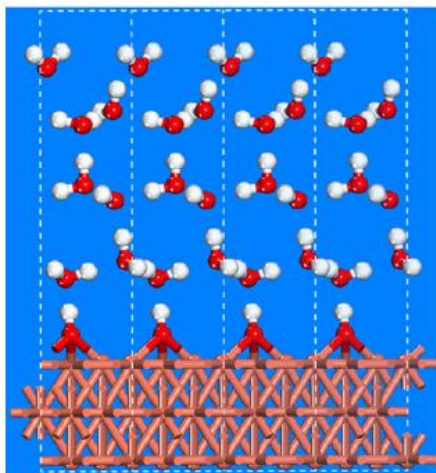
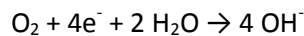
Keywords: computationele materiaalkunde, corrosie, microstructuur, DFT

Metalen worden tijdens hun gebruik blootgesteld aan een enorme waaier van verschillende milieus. Interactie tussen het metaal en zijn omgeving kan leiden tot een degradatie van de prestatie van het metaal.

“Corrosie” kan gezien worden als de verzamelnaam voor dit type van processen waarvan het “roesten” van ijzer/staal één van de best gekende voorbeelden is. Dit proces treedt op aan het metaaloppervlak (bv. ijzer) dat in contact staat met een elektrolyet (bv. regenwater). Aan het metaaloppervlak zullen lokaal positieve metaalionen in oplossing gaan, en daarbij elektronen in het metaal achterlaten (het anodisch deel van het oppervlak):



De achtergelaten elektronen worden elders op het oppervlak (het kathodisch deel) gebruikt voor reductiereacties, waarbij bijvoorbeeld zuurstof dat in de elektrolyet opgelost is, reageert met water om hydroxyl-ionen te vormen, die dan met het ijzeroppervlak reageren tot ijzerhydroxiden of ‘roest’:



Kwantumfysische simulatie van OH-geadsorbeerd op Cu(111), met daarboven watermoleculen (overgenomen uit Taylor-2007).

Wegens de cruciale rol van elektronen in deze reacties, wordt corrosie een *elektrochemisch proces* genoemd.

Corrosie is een van de onderzoeksthema's van de vakgroep Toegepaste Materiaalwetenschappen (zie bvb. Corrosion Science, 53, 2011, pp. 3166–3176 of Materials Science Forum, Vols. 702-703, 2012 pp 673-676.). Onlangs is een nieuw project gestart waarbij de invloed van de microstructuur van een metaal op corrosiegedrag bestudeerd wordt. Het is hierbij duidelijk geworden dat de lokale kristaloriëntatie in een bepaalde korrel een significante impact heeft op de kinetiek van het corrosieproces.

Een van de manieren waarop we dieper inzicht in deze observatie willen krijgen, is door de relevante chemische reacties in een computer na te bootsen met kwantumfysische methodes zoals die gebruikt worden aan het Centrum voor Moleculaire

Modellering (CMM). Het grote voordeel van deze aanpak is dat we daarbij precies kunnen volgen wat er met ieder individueel atoom aan het oppervlak gebeurt. Experimentele technieken middelen onvermijdelijk uit over (te) grote aantallen atomen.

Doelstelling Kwantumfysische modellering van corrosie is een nieuw terrein voor ons. Daarom starten we van een systeem en een methode die in de literatuur goed bestudeerd is: de adsorptie van OH- ionen op een Cu(111)-oppervlak (Taylor et al., Journal of Electroanalytical Chemistry 607 (2007) 167–174, zie ook figuur hiervoor). We zullen hun resultaten eerst proberen te reproduceren, en dan dezelfde methode toepassen op een ander type Cu-oppervlak (bvb. Cu(100)), op een getrapt Cu-oppervlak, en op een korrelgrens tussen twee verschillende Cu-vlakken. Hiermee bouwen we inzicht op over de rol van oppervlaktedetails – en onrechtstreeks dus van de microstructuur – op het corrosieproces. Die informatie kan dan gebruikt worden om corrosie-experimenten, waarbij polykristallijn koper met korrels met o.a. deze kristalvlakken aan het oppervlak blootgesteld worden aan corrosief milieu en die in Gent en aan de VUB uitgevoerd worden te interpreteren.

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

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>