

## PREHY

Precipitation hardened high strength alloys for hydrogen transport and storage infrastructure

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft, 41. Ausschreibung Produktion der Zukunft (KP)	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.10.2022	<b>Projektende</b>	31.12.2025
<b>Zeitraum</b>	2022 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	39 Monate
<b>Keywords</b>	Hydrogen embrittlement, high performance materials, computational material design, materials for hydrogen economy		

### Projektbeschreibung

Wasserstoffversprödung stellt eine Herausforderung in allen Sektoren der aufstrebenden Wasserstoffwirtschaft dar. Es bedarf daher hochwertiger metallischer Legierungen, die im Kontakt mit Wasserstoff (H) sicher eingesetzt werden können. Hochfeste kubisch flächenzentrierte (kfz) Werkstoffe wie austenitische Stähle und Ni-Basis-Legierungen stellen die aussichtsreichste Klasse in Bezug auf Festigkeit, Tieftemperatureigenschaften und Beständigkeit gegen H-Versprödung dar. Sie reagieren im Vergleich zu kubisch raumzentrierten Stählen bei Festigkeiten über 1000 MPa bekanntermaßen weniger empfindlich auf H-Versprödung und zeigen auch keinen Spröd-Duktil-Übergang hin zu kryogenen Anwendungstemperaturen. Trotz der wesentlich besseren Korrosionsbeständigkeit, auch im Zusammenhang mit H-haltigen Gasen und Flüssigkeiten, leiden ausscheidungsgehärtete hochfeste kfz-Legierungen und daraus hergestellte Komponenten wie z.B. kryogene Hochdruckbehälter und Ventile für Produktion, Transport and Lagerung von Wasserstoff, jedoch auch unter H-Versprödung. Die enormen Infrastruktur-investitionen zur Ermöglichung der Wasserstoffwirtschaft in den nächsten Jahren erfordern insbesondere im Hinblick auf ökologische und ökonomische Effizienz neue spezialisierte Werkstoffe für betriebssichere Leichtbaulösungen.

Die Mikrostruktur spielt bei der H-Versprödung bekannter Weise eine entscheidende Rolle, gänzlich verstanden sind die H-Versprödungsmechanismen allerdings nicht. Im Falle von kfz-Werkstoffen kann das Problem der H-Versprödung auf die Rolle von Grenzflächen und kohärenten Ausscheidungen, welche für die bemerkenswerte Festigkeit einiger dieser Legierungen verantwortlich sind, eingegrenzt werden. In modernen austenitischen Stählen und Nickelbasislegierungen kommt diese Rolle den intermetallischen  $\gamma'$ - und  $\gamma''$ - Ausscheidungen zu, die einen unterschiedlichen Kohärenzgrad zur Matrix aufweisen. Eine gründliche Untersuchung der Wechselwirkung von H mit diesen Ausscheidungen ermöglicht eine wissensbasierte Entwicklung neuer Werkstoffe mit erhöhter Beständigkeit gegen H-Versprödung und ausgezeichneten mechanischen Eigenschaften, die zu substantiellen Verbesserungen gegenüber den derzeitig verwendeten Legierungen bei gleichbleibenden Kosten oder zu ähnlichen Eigenschaften bei geringeren Kosten führen. Aus wirtschaftlicher und ökologischer Sicht haben die superaustenitischen Stähle ein großes Potenzial, die teureren und rohstoffintensiveren Nickel-Basis-Superlegierungen zu ersetzen.

Wissensbasiertes Materialdesign ist eng mit modernen Berechnungsansätzen verbunden, einschließlich atomistischer ab-initio Modellierung und künstlicher Intelligenz, sowie mit hochauflösenden experimentellen Methoden zur Untersuchung von

Mikrostruktur und Versprödung. Im Rahmen dieses Projekts wird ein neuer theoretisch und experimentell skalenübergreifender Ansatz zur Untersuchung der Mikrostruktur-Wasserstoff-Interaktion entwickelt und angewandt. Die Ergebnisse werden in Form von digitalen Materialdesignrichtlinien (MDR) umgesetzt, die auf eine Beschleunigung (30%) des Materialentwicklungszyklus inklusive Kostenreduktion von 45% abzielen. Die MDR werden durch die Herstellung einer Reihe neuer Modelllegierungen validiert und durch eine detaillierte Untersuchung ihrer Beständigkeit gegen H-Versprödung bei Raum- und Tiefsttemperaturen, die für Anwendungen mit flüssigem H relevant sind, validiert.

## **Abstract**

Hydrogen embrittlement (HE) is an inevitable problem in all sectors of the emerging hydrogen (H) economy that requires high quality materials, such as metallic alloys, that can be safely used in a direct contact with H. The high strength face centered cubic (fcc) materials like austenitic steels and Ni-base alloys represent the most prospective class of high strength materials in terms of resistance to HE and low temperature ductility. They are known to be less sensitive to HE compared to bcc-based martensitic steels at strength levels above 1000 MPa and they do not show a ductile-to-brittle transition. Despite substantially better performance in aggressive environments, including exposure to H-containing gases and fluids, precipitation-hardened fcc alloys and components composed of them, like high pressure cryogenic tanks and valves for H production, transport and storage, suffer from HE as most of the metallic alloys. The huge infrastructure investments necessary for the transition to H economy in the coming years demands ecologically and economically efficient lightweight design solutions. Hence, there is a need for new specialized materials that can fulfil the raising requirements of the new age of the green economy.

The state-of-the-art research studies give a very special place to the role of microstructure in the HE problem, though the topic remains to be too large to be fully understood in general until now. In the case of fcc materials, the problem of HE can be narrowed down to the role of interfaces and coherent precipitates, responsible for remarkable strength of some of these alloys. In modern austenitic steels and aged hardened nickel base alloys, this role is given to the gamma prime ( $\gamma'$ ) and gamma double prime ( $\gamma''$ ) strengthening precipitates with a different degree of coherency to the fcc alloy matrix. A thorough investigation of H interaction with these precipitates should enable a knowledge-based design of new materials with increased resistance to HE and excellent mechanical properties, giving them a new edge over currently used alloys at given cost or with similar properties at reduced cost. With respect to the economical ecological point of view the PH austenitic steels bear a big potential to replace the more expensive and recourse demanding nickel-based superalloys.

The most efficient modern way of the knowledge-based material design is closely connected to the state-of-the-art computational approaches, including methods of predictive quantum mechanical calculations and artificial intelligence (machine learning), and the experimental methods of HE and microstructure investigations across the length scales. To address the new challenges of the material design for H applications, a radically new multiscale theoretical and experimental approach for investigation of the microstructure-HE relationship is going to be implemented within this project. The results of the research work will be implemented in a form of digital material design guidelines (MDG) aiming at (30%) acceleration and (45%) cost reduction of the material development cycle in industry. The MDG will be validated by production of a series of new model alloys that can be produced with a minimal ecological footprint and a detailed investigation of their resistance to HE at ambient and cryogenic temperatures, relevant for liquid H applications.

## **Projektkoordinator**

- Materials Center Leoben Forschung GmbH

## **Projektpartner**

- voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH & Co KG
- Montanuniversität Leoben