

## **APROXIMACIÓN POR SIMULACIÓN AB-INITIO A LA FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO EN UNA RED DE HIERRO BCC.**

**J. Sánchez<sup>1</sup>, P. de Andrés<sup>2</sup>, J. Fullea<sup>1</sup>, C. Andrade<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja” (CSIC). C/ Serrano Galvache, 4,  
28033 Madrid.  
E-mail: javiersm@ietcc.csic.es

<sup>2</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), E-28049 Cantoblanco, Madrid.  
pedrodeandres@icmm.csic.es

### **RESUMEN**

La fragilización por hidrógeno es una de las causas más frecuentes de fallo en estructuras sometidas a esfuerzos mecánicos. Los aceros de alta resistencia empleados en estas estructuras se componen de una matriz ferrítica, o lo que es lo mismo, de una estructura de hierro cúbica centrada en el cuerpo (BCC).

Utilizando cálculos mecano-cuánticos de primeros principios hemos estudiado la interacción del hidrógeno con la red cúbica centrada en el cuerpo del hierro. El hidrógeno intersticial puede ocupar dos posiciones de alta simetría en la red: el hueco octaédrico y el tetraédrico. Nuestros cálculos nos proporcionan barreras de difusión entre ambos huecos, que analizamos para entender la propagación del hidrogeno a través del cristal de hierro. Se ha estudiado el efecto de los siguientes parámetros en la barrera de difusión: (i) relajaciones dinámicas de los átomos de hierro, la densidad de hidrógeno, y el efecto de tensiones externas.

### **ÁREAS TEMÁTICAS PROPUESTAS:**

Métodos y Modelos Analíticos y Numéricos.

### **PALABRAS CLAVE (máximo 3):**

Fragilización por hidrógeno, ab-initio.