

MATERIAALKUNDE

1.

Materialen, materiaalkunde en duurzaamheid

Materialen zijn alomtegenwoordig in ons dagelijks leven. Denk maar aan wat nodig is voor wegenbouw, gereedschappen, vliegtuigen, smartphones, kunstheupen en hartkleppen, squashraketten en snowboards, lichtgewichtbatterijen, zonnecellen en brandstofcellen. Materialen zijn bepalend voor de esthetiek en de prestaties van al deze producten en zorgen mee voor het gebruiksgemak; ze zijn ook de springplank voor nieuwe technologische ontwikkelingen. Om materialen te produceren hebben we energie en grondstoffen nodig, vandaar dat de materiaalkunde ook een centrale rol speelt in duurzame industriële ontwikkeling en het verantwoord gebruik van grondstoffen en energiebronnen.

1.1 Materialen

We capteren licht met onze ogen en na dataverwerking en -interpretatie in onze hersenen, zien we een beeld van de realiteit dat we doorgaans met personen en dingen associëren, zoals het beeld genomen tijdens één van de nijldige beklimmingen van de Ronde van Vlaanderen (figuur 1.1a). De voorwerpen die we dagelijks om ons heen zien en gebruiken, worden met materialen gemaakt en dus kunnen we een complementair beeld oproepen, nu met aandacht voor de gebruikte materialen (figuur 1.1b). Het valt meteen op dat materialen aanwezig zijn in zeer diverse sectoren zoals transport, elektronica, chemie, cosmetica, optica, biomedica, ...



Figuur 1-1. (a) Links: een beeld van een finale in een Vlaamse wielervederklasseker; (b) rechts: hetzelfde beeld met aanduiding van een aantal van de gebruikte materialen (met dank aan K. Van Acker).

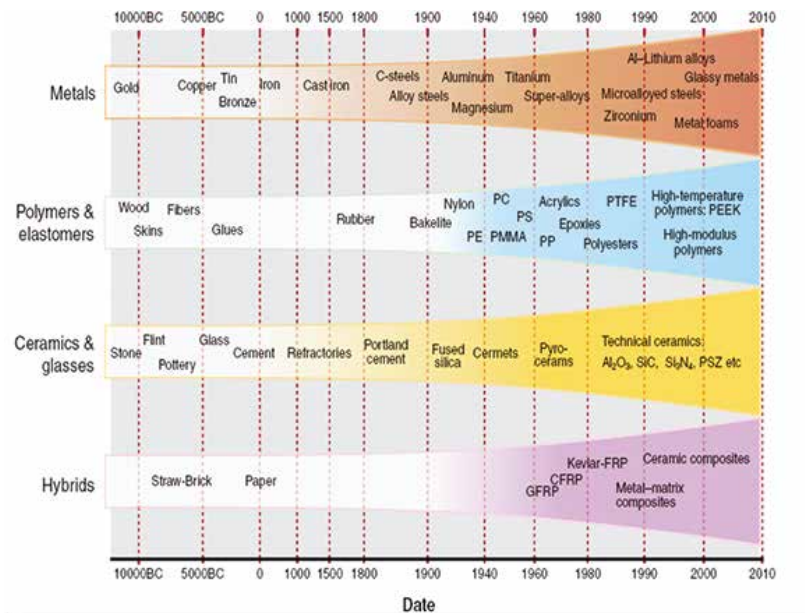
De ingenieur is een technische creatieveling die diverse systemen, gaande van wolkenkrabbers tot nanosystemen ontwerpt, ontwikkelt en verwezenlijkt. Die systemen bestaan uit onderdelen met elk hun eigen functionaliteit. Als ze reëel (niet-virtueel) zijn, gebruikt de ingenieur materialen met de geschikte (mechanische, thermische, elektrische, magnetische, ...) eigenschappen om die (sub)systemen te vervaardigen.

De beschikbaarheid van materialen is over de laatste millenia heel sterk toegenomen: van de enkele natuurlijk voorkomende materialen tot de veelheid aan hedendaagse materialen (figuur 1.2). Zo bevat de online databank van Matweb² meer dan 100 000 materiaalbestanden met voor elk materiaal de samenstelling en de voornaamste eigenschappen. Op dit ogenblik wordt het aantal beschikbare materialen geschat op 160 000.

Het is dan ook nodig om deze informatie te systematiseren. De materialen worden klassiek in materialenfamilies ondergebracht: we onderscheiden metalen, polymeren, keramieken en composieten. Elk van deze families heeft kenmerkende eigenschappen, waarvan we een aantal in de volgende hoofdstukken in detail zullen leren kennen.

Metalen hebben een relatief hoog smeltpunt, hoge specifieke dichtheid, hoge thermische en elektrische geleidbaarheid, een relatief hoge stijfheid en zijn doorgaans plastisch vervormbaar. Soms gebruiken we metalen in een relatief zuivere vorm, zoals de koperlegeringen voor elektrische toepassingen. Meestal echter zijn metaallegeringen een complex mengsel van verschillende elementen, zoals de AA7000 reeks aluminiumlegeringen die worden gebruikt in de vliegtuigbouw en die naast het hoofdbestanddeel ook Zn, Mg, Si, Fe en Cu bevatten. Binnen de metaallegeringen vormen de staallegeringen (legeringen van ijzer, koolstof en eventueel nog andere legeringselementen) veruit de grootste groep omwille van hun veelzijdigheid en ruime beschikbaarheid als constructiemateriaal in de bouw, transport, ...

2. Matweb: www.matweb.com



Figuur 1-2. Evolutie van de beschikbare materialen over de voorbije millennia (Herdruckt van Ashby et al., 2014).

Polymeren zijn licht, weinig thermisch en elektrisch geleidend en hebben doorgaans een lage stijfheid. Ze hebben een relatief lage gebruikstemperatuur en hun eigenschappen op zich zijn ook heel temperatuursafhankelijk. We onderscheiden bij de polymeren een aantal subfamilies:

- De *thermoplasten* die zich laten smelten en uitstekend plastisch vervormbaar zijn, zoals polymethylmetacrylaat dat bijvoorbeeld gebruikt wordt voor lenzen.
- De *thermoharders* die niet kunnen gesmolten worden en niet plastisch vervormbaar zijn. Een voorbeeld van een thermoharder is bakeliet (fenolformaldehyde) dat gebruikt wordt voor onder andere hittebestendige handvaten.
- De *elastomeren* of rubbers die zich laten kenmerken door een zeer lage stijfheid en hoge elastische rek, zoals polyisopreen (synthetisch ‘natuurlijk’ rubber) dat in banden wordt gebruikt.

Keramieken (typisch oxides, nitriden, carbiden, ...) zijn relatief stijf, sterk onder drukspanningen, bros en chemisch stabiel, zodat ze ook in een reactieve omgeving op hoge temperatuur kunnen worden aangewend. Ze hebben een relatief lage dichtheid en zijn dikwijls elektrisch en thermisch weinig geleidend. Keramische materialen vinden we veelvuldig in de bouwsector, zoals beton, baksteen of natuursteen, maar ook in hoogtechnologische toepassingen, bijvoorbeeld zirkoonoxide voor de schoepen van een turbolader of loodzirkoonmetaan voor piezo-elektrische actuatoren.

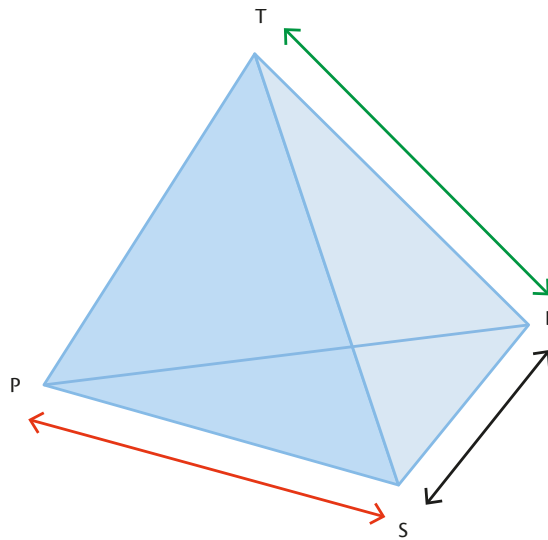
Composieten of hybriden zijn uit meerdere materialen samengesteld om zo de beste eigenschappen van de samenstellende materialen te kunnen combineren. Vooral de vezelversterkte polymeren nemen de laatste jaren een hoge vlucht. De combinatie van de lage dichtheid van polymeren (bijvoorbeeld een epoxy) met de hoge stijfheid van de vezel (bijvoorbeeld koolstofvezel) is aantrekkelijk voor toepassingen waar een hoge specifieke stijfheid van belang is, zoals in de (tran)sportsector.

1.2 Materiaalkunde: de driehoek/tetraëder

Materiaalkunde is de ingenieursdiscipline die zich richt op de productie of transformatie, inwendige structuur, eigenschappen en toepassingen van materialen en hun onderlinge relaties. We spreken daarom van de materiaalkundedriehoek 'processen-structuur-eigenschappen' of meer volledig van de materiaalkundetetraëder 'processen-structuur-eigenschappen-toepassingen' (figuur 1.3). Met deze tetraëder willen we de verschillende deeldomeinen van de materiaalkunde en hun onderlinge verwevenheid voorstellen.

- *Processen* zijn de bewerkingen waarmee materialen vanuit grondstoffen geproduceerd worden, bijvoorbeeld de productie van ijzer en staal uit ijzererts (zie verder in paragraaf 1.5), of waarmee we materialen naar een tussenvorm (halffabrikaat) of eindvorm transformeren, bijvoorbeeld het spuitgieten van een thermoplast tot een waterfles.
- *Structuur* is de opbouw van het materiaal. De lengteschaal waarop de structuur wordt bestudeerd is afhankelijk van het materiaal en van de eigenschappen die beoogd worden. Zo zijn voor elektrische eigenschappen van halfgeleiders de elektronenstructuur, de atomaire structuur en de microstructuur van belang en voor polymeercomposieten komt daar ook nog eens de vezel/matrix architectuur bovenop.
- We onderscheiden structurele en functionele *eigenschappen*. Structurele eigenschappen van het materiaal zijn van belang in toepassingen waar de mechanische integriteit van de structuur van primordiaal belang is (bijvoorbeeld meubelen, gebouwen, transport, ...). Naast de mechanische eigenschappen (treksterkte, elasticiteitsmodulus, ...) zijn ook de kostprijs, de specifieke dichtheid en de ecologische impact van de materialen van belang. Met functionele eigenschappen worden de andere eigenschappen aangeduid, zoals thermische, elektrische, magnetische en optische eigenschappen.
- Met *toepassingen* bedoelen we de processen, producten, systemen en subsystemen die met materialen worden geconcretiseerd. De toepassing zal bepalen welke structurele en/of functionele eigenschappen van belang zijn en welk materiaal we zullen kiezen.

Deze vier deeldomeinen zijn sterk met elkaar verbonden. Wanneer men bijvoorbeeld enkele parameters verandert in de processing, dan zal dat meestal resulteren in een andere microstructuur en in een wijziging van de eigenschappen. Hierdoor kunnen de mogelijke toepassingsdomeinen veranderen. Het is één van de kernopdrachten van een materiaalkundig ingenieur om deze relaties te beheersen en te gebruiken.



Figuur 1-3. De materiaalkundetetraëder illustreert de deeldomeinen en hun relaties: P: processen: productie/transformatie – E: eigenschappen – S: structuur – T: toepassingen.

Als er een nieuw materiaal ontdekt of ontwikkeld wordt, bijvoorbeeld in het geval van koolstofnanobuizen (*carbon nanotubes*), dan gaat de aandacht in eerste instantie naar de structuur en de eigenschappen van dat materiaal (cf. Nobelprijs 1996³) en worden vervolgens op basis van deze eigenschappen geschikte toepassingsdomeinen gezocht of ontwikkeld (*market push*). Koolstofnanobuizen worden al sinds 2005 commercieel gebruikt in composietmaterialen voor sportfietsen⁴, en tal van andere toepassingen zijn in ontwikkeling. Samen met de aard van de aan te boren toepassingsdomeinen worden ook de geschikte productieprocessen uitgevonden en ontwikkeld, omdat een grootschalige productie andere processen en procesvoeringen vereist dan deze die gebruikt worden voor het ontdekkings- en ontwikkelingswerk.

Het gebeurt echter ook dat er vanuit een bepaalde toepassing (bijvoorbeeld het hiteschild voor een kernfusiereactor) de nood wordt geformuleerd om een materiaal te ontwikkelen. Dit betekent dat de product- of procesontwikkelingsingenieur de eigenschappen specificeert waaraan het materiaal moet voldoen (toelaatbare gebruikstemperatuur, gewenste hoge warmtegeleiding, thermische schokbestendigheid, ...) en materiaalkundigen op basis van die specificaties een materiaal met de gepaste structuur en eigenschappen ontwerpen en produceren (*market pull*).

In beide gevallen – *market push* of *market pull* – komen de verschillende deeldomeinen van de materiaalkunde en hun onderlinge relaties in beeld. De kennis van de relaties tussen de toepassing en eigenschappen (figuur 1.3, $T \leftrightarrow E$), eigenschappen en structuur

3. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1996/

4. <http://www.zyvextech.com/>

(figuur 1.3, $E \Leftrightarrow S$), en structuur en productie- en transformatieprocessen (figuur 1.3, $S \Leftrightarrow P$) creëren het kader waarin op een doelgerichte manier vanuit de ontdekking van materialen nieuwe toepassingsdomeinen kunnen worden aangesproken of vanuit de vereisten van een toepassingsdomein een nieuw materiaal kan worden ontwikkeld.

Het volstaat wellicht om hier één voorbeeld te geven van de relaties tussen de deeldomeinen van de materiaalkunde. Hogedichtheidpolyethyleen (HDPE) voor blaasvormen (productie van onder andere flessen) heeft een treksterkte (kracht/oppervlak waarbij het materiaal breekt onder trekbelasting) van ongeveer 30 MPa. Als we datzelfde HDPE nu als een draad spinnen uit een gel, stijgt de treksterkte tot 3000 MPa, een stijging met een factor 100. Dit is een voorbeeld van een $P \Leftrightarrow E$ -relatie. Door de keuze van het transformatieproces (blaasvormen of spinnen) verandert de eigenschap (treksterkte) van het HDPE. In de loop van deze tekst zullen er nog talrijke voorbeelden van die onderlinge relaties worden gegeven, het is eigenlijk de rode draad doorheen de materiaalkunde en dus ook van deze inleidende tekst.

Materiaalkunde is dus de ingenieurswetenschap die de feitelijke kennis van en de inzichten in de deeldomeinen en de relaties tussen die deeldomeinen, de methoden om die kennis te verwerven (experimentele en virtuele) en de strategieën (ontwerpmethodologieën) om deze kennis toe te passen in processen en producten, omvat.

1.3 Materialen en technologische vooruitgang

1.3.1 De fiets gisteren, vandaag en morgen

Materialen bepalen (en beperken) de ontwerpruimte. Als er nieuwe materialen ontwikkeld worden, schept dit voor de ontwerper nieuwe mogelijkheden. Deze algemene ontwerp-wetmatigheid illustreren we met een schets van de ontwikkeling van de fiets (figuur 1.4). Het voorbeeld zal aantonen hoe de beschikbaarheid van nieuwe materialen (staal, rubber, composieten, batterijmaterialen, ...) het concept van de fiets heeft beïnvloed.

Er wordt nog druk gedebatteerd over wie als eerste het concept van de fiets heeft bedacht. Er zouden ontwerpen zijn van de hand van Leonardo da Vinci of één van zijn leerlingen. De meeste bronnen⁵ vermelden de *vélocipède*, die door Blanchard en Magurier werd beschreven in het *Journal de Paris* in 1779. De *vélocipède* is een loopfiets met twee wielen verbonden door een houten balkvormig element waarop de 'fietser' kan plaatsnemen en zich kan verplaatsen door zich met de voeten vooruit te duwen. In 1817 publiceerde Freiherr Karl Drais von Sauerbronn een ontwerp van een stuurbare *vélocipède*, later de Draisine of

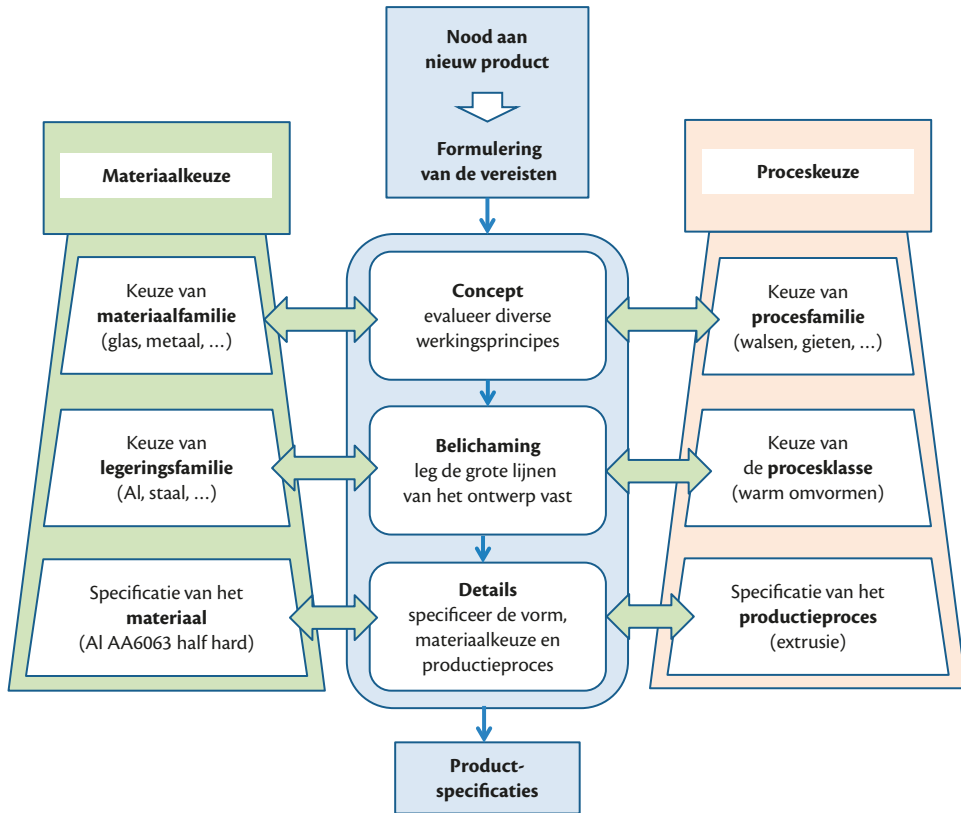
5. Naar McMahon, C.J. & Graham, C.D. (1992). *Introduction to Materials Engineering, the Bicycle and the Walkman*. Merion Books, ISBN 0-9646598-0-8 en http://en.wikipedia.org/wiki/History_of_the_bicycle



Figuur 1-4. Enkele mijlpalen in het ontwerp van de fiets. Linksboven: de ‘houten’ Draisienne, een loopfiets; rechtsboven: de voorwielangedreven (houten/stalen) fiets van Pierre Lallemand; linksonder: de ‘staal/rubber’ Humber met diamantframe en ketting; rechtsonder: de ‘carbon’ fiets, waarbij materialen en aërodynamica elkaar vinden.

Draisienne genaamd, die in Frankrijk en Duitsland werd geproduceerd. De Draisienne werd voornamelijk in hout geconstrueerd en heeft houten wielen met een ijzeren strook op de buitenkant, messing bussen en weegt ongeveer 22 kg. Kirkpatrick Macmillan (rond 1840) en Pierre Lallemand (rond 1865) ontwikkelden aandrijvingssystemen op respectievelijk de achteras (trappers en stangenmechanisme) en de vooras (trappers). De volgende periode van 30 jaar wordt gekenmerkt door een grote creativiteit in ontwerp, dankzij onder andere de ruime beschikbaarheid van staal als constructiemateriaal. Henry Bessemer ontwikkelde in 1856 het ‘Bessemer-proces’ dat toelaat om ruwijzer uit de hoogoven te zuiveren tot staal en zo de kwaliteit ervan sterk te verbeteren. Dit maakte de productie mogelijk van wielen met spaken onder permanente trekbelasting, kogellagers en kettingoverbrenging. Verbeterde rubbers leidden tot de introductie van volle en later pneumatische banden. Dit alles culmineerde in het ontwerp van de ‘veiligheidsfiets’ door J.K. Starley en de Humber in 1890 met het typische diamantkader (de naam verwijst hier naar de vorm van het kader en niet naar het materiaal diamant).

De laatste decennia werden kaders geproduceerd in verschillende materialen die elk hun voorstanders hebben, ook afhankelijk van de gebruikscondities van de fiets. De elementen die spelen zijn onder andere gewicht, stijfheid en kostprijs. De materialen zijn onder andere aluminiumlegeringen zoals de AA6061 en de AA7005, hoogwaardige staallegeringen zoals



Figuur 1-5. De verschillende stappen van het ontwerpproces, met simultane selectie van gepaste materialen en productieprocessen.

het AISI 4130, titaanlegeringen zoals de Ti-3Al-2.5V of koolstofvezelpolymercomposieten (het zogenaamde 'carbon'). Het gebruik van deze verschillende materialen is onder andere weerspiegeld in het materiaalgebruik voor de fietsen waarmee het werelduurrecord sinds 1972 werd gereden. Als we de recente werelduurrecords als referentie nemen, zien we vooral het gebruik van staal en koolstofvezelcomposiet voor het kader van de fiets.⁶

Recente ontwikkelingen hebben vooral betrekking op de elektrische fietsen met Li-ion lichtgewichtbatterijen. Het is vooral de beschikbaarheid van nieuwe materialen voor batterijen die hier voor een doorbraak zorgt.

6. http://en.wikipedia.org/wiki/Hour_record

1.3.2 De selectie van materialen

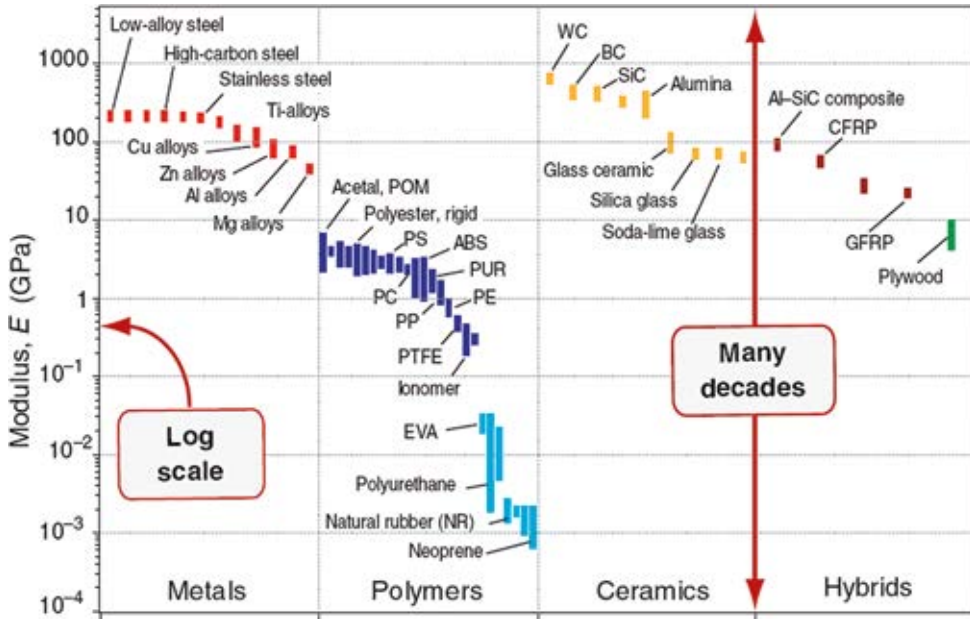
Het ontwerpen van processen en producten gebeurt in een aantal stappen. Het ontwerp start met de behoefte aan een product of proces met een of andere functie. De ontwerper zal die vraagstelling vertalen naar de functie van het product/proces en een lijst van voorwaarden of specificaties waaraan het ontwerp moet kunnen voldoen. In een tweede stap worden concepten en werkingsprincipes die aan die specificaties kunnen beantwoorden, ontwikkeld en vergeleken. Het gekozen concept wordt dan uitgewerkt, eerst algemeen en vervolgens in detail. Simultaan met die verschillende stappen wordt ook de materiaalkeuze en de keuze van het productieproces bepaald, in meer detail naargelang het ontwerpproces vordert (zie figuur 1.5).

Het grote aantal beschikbare materialen maakt dat we de keuze van de meest geschikte materialen voor de verschillende onderdelen van het ontwerp best op een systematische wijze kunnen uitvoeren. In hoofdstuk 4 besteden we hier de volle aandacht aan. Voor het goed begrip hier volstaat het om aan te geven dat er geïntegreerde systemen voor materiaalselectie bestaan die de materiaal informatie systematisch bevatten. Figuur 1.6 geeft een voorbeeld van een mogelijke 'materiaalfiche' die in de software wordt opgeslagen. Dergelijke bestanden kunnen heel handig zijn bij het selecteren van een geschikt materiaal tijdens het ontwerp, in eerste instantie omdat het de ontwerper bevrijdt van het verzamelen van alle informatie, in tweede instantie omdat een geïnformatiseerd systeem toelaat om zoekstrategieën uit te denken, zonder elk van de bestanden manueel te moeten screenen.

Acrylonitrile butadiene styrene (ABS)			
The Material			
ABS (Acrylonitrile-butadiene-styrene) is tough, resilient, and easily molded. It is usually opaque, although some grades can now be transparent, and it can be given vivid colors. ABS-PVC alloys are tougher than standard ABS and, in self-extinguishing grades, are used for the casings of power tools.			
General properties			
Density	1e3	- 1.2e3	kg/m ³
Price	2	- 2.7	USD/kg
Mechanical properties			
Young's modulus	1.1	- 2.9	GPa
Hardness - Vickers	5.6	- 15	HV
Elastic limit	19	- 51	MPa
Tensile strength	28	- 55	MPa
Compressive strength	31	- 86	MPa
Elongation	1.5	- 1e2	%
Endurance limit	11	- 22	MPa
Fracture toughness	1.2	- 4.3	MPa.m ^{1/2}
Thermal properties			
Thermal conductivity	0.19	- 0.34	W/m.K
Thermal expansion	85	- 230	µstrain/°C
Specific heat	1400	- 1900	J/kg.K
Glass Temperature	88	- 130	°C
Max service temp.	62	- 90	°C
Electrical properties			
Resistivity	2.3e21	- 3e22	ohm.cm
Dielectric constant	2.8	- 2.2	
Typical uses			
Safety helmets; camper tops; automotive instrument panels and other interior components; pipe fittings; home-security devices and housings for small appliances; communications equipment; business machines; plumbing hardware; automobile grilles; wheel covers; mirror housings; refrigerator liners; luggage shells; tote trays; mower shrouds; boat hulls; large components for recreational vehicles; weather seals; glass beading; refrigerator breaker strips; conduit; pipe for drain-waste-vent (DWV) systems.			



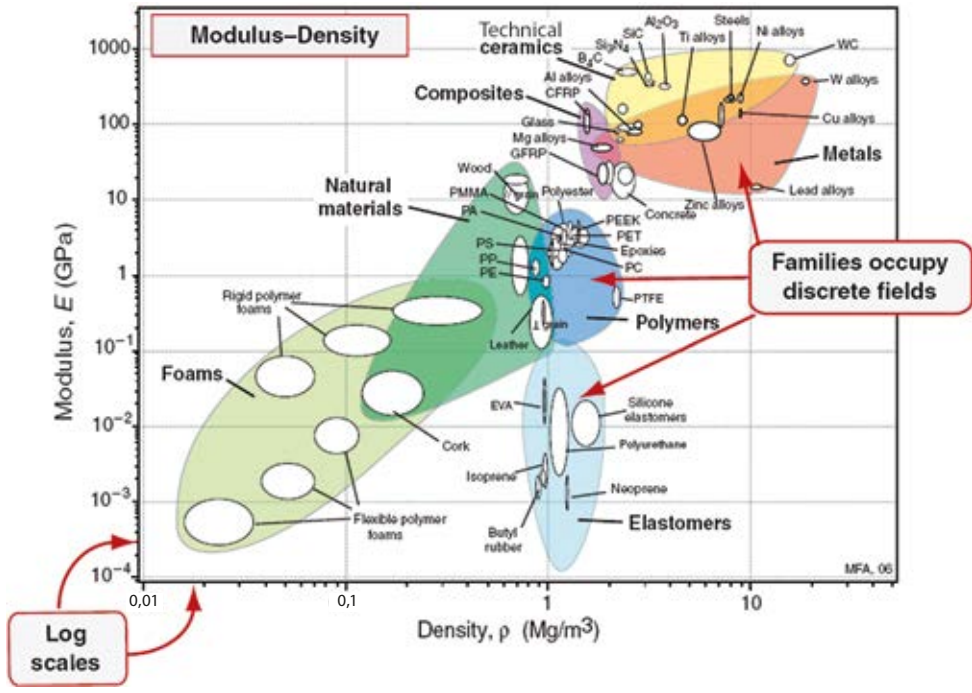
Figuur 1-6. Een materiaalbestand met eigenschappen voor ABS (Herdruckt van Ashby et al., 2014).



Figuur 1-7. Voorbeeld van een staafdiagram voor de elasticiteitsmodulus (Herdruckt van Ashby et al., 2014).

We kunnen de informatie uit die materiaalbestanden extraheren om voor een of meerdere materiaaleigenschappen overzichtsfiguren te maken. Indien we dit voor één eigenschap doen voor de verschillende geselecteerde materialen spreken we van een *staafdiagram* (figuur 1.7), als we twee eigenschappen tegenover elkaar uitzetten noemen we dat een *bellen-diagram of Ashby-diagram*, naar prof. Michael Ashby, die als eerste voorstelde om dergelijke diagrammen te gebruiken (figuur 1.8). Er worden logschalen gebruikt omdat eigenschappen over de verschillende materialenfamilies heen over verschillende grootteorden kunnen variëren en ook omdat dit toelaat materiaalselectie en meer bepaald het rangschikken van de materialen volgens een materiaalindex grafisch voor te stellen. De variatie in een materialenfamilie is vrij beperkt, zodat zowel in staafdiagrammen als in bellendiagrammen een typisch bereik van de waarden van de eigenschappen voor een welbepaalde materialenfamilie kan worden gedefinieerd. In het hier getoonde bellendiagram zitten de metalen en keramieken bijvoorbeeld helemaal rechts bovenaan omdat ze een relatief hoge elasticiteitsmodulus combineren met een relatief hoge dichtheid, de schuimen (composieten van metalen, keramieken of polymeren met een gas) helemaal links onderaan.

Tijdens het ontwerp worden de functionale vereisten voor de (sub)componenten vertaald als grenswaarden of te optimaliseren waarden voor (een combinatie van) materiaaleigenschappen. Hieruit volgt dat materialen en hun eigenschappen de ontwerpruimte definiëren en bijgevolg medebepalend zijn voor de technologische vooruitgang. In zijn studie



Figuur 1-8. Voorbeeld van een bellendiagram voor specifieke dichtheid en elasticiteitsmodulus (Herdruckt van Ashby et al., 2014).

The Advanced Materials Revolution – Technology and Economic Growth in the Age of Globalization geeft S.L. Moskowitz onder andere op basis van interviews met industriëlen en technologen een inschatting van de impact van materialen (zie tabel 1.1). Deze studie toont de cruciale en in belang toenemende rol die materiaalontwikkeling heeft in ICT, energie en biotechnologie. Voorbeelden van domeinen waar materiaalontwikkeling essentieel is voor de verdere technologische ontwikkeling en innovatie zijn de nano-elektronica, batterijtechnologie, fotovoltaïsche cellen, kernfusie en biomedische toepassingen.

Tabel 1-1. Impact van geavanceerde materiaaltechnologie op de ICT, energie en biotechnologie-sectoren (bijdrage in percent) (Moskowitz, 2009).

	1970	1980	1990	2000	2010	2020	2030
ICT	15	25	40	55	65	75	85
Energie	10	15	30	45	55	65	70
Biotechnologie	5	10	20	30	45	55	65