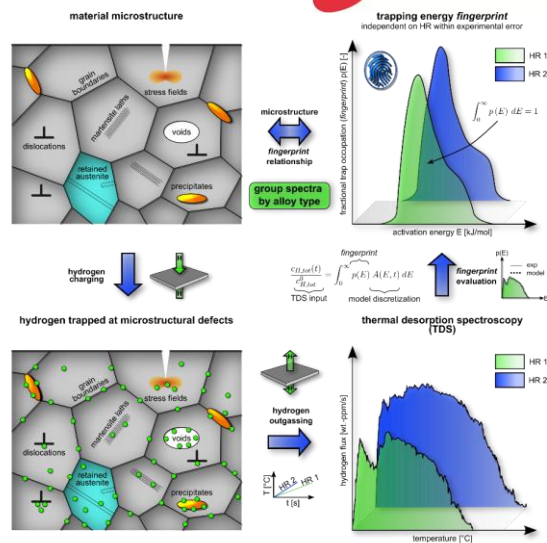


**IC-MPPE**  
**Integrated Computational**  
**Materials Process and Product**  
**Engineering.**

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekt: HyResMatII, 08/2020-09/2025, multi-firm



Übersicht über die „Fingerprint“-Methode. Bild: <https://doi.org/10.1038/S41529-025-00718-Z>  
 Licensed under CC-BY 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.de>)

# DIE «FINGERPRINT» METHODE – FORTSCHRITT IN DER ANALYSE VON WASSERSTOFF IN STAHL

DIE NEU ENTWICKELTE „FINGERPRINT“-METHODE ZUR ANALYSE VON H<sub>2</sub>-DESORPTIONSMESSUNGEN ERMÖGLICHT EINE SCHNELLERE ENTWICKLUNG VON WASSERSTOFFRESISTENTEN LEGIERUNGEN FÜR DIE ENERGIEWENDE.

Wasserstoff als kleinstes Atom ist nicht nur im Fokus der Energiewende, sondern kann auch schwer vorhersagbares Versagen in Stählen – die Wasserstoffversprödung – hervorrufen. Ob durch Korrosion oder den Kontakt mit Wasserstoffgas können Stähle Wasserstoff aufnehmen und so frühzeitig versagen. Zentral dabei ist die Anreicherung von Wasserstoff an Korngrenzen, Versetzungen und Rissen, die zur Materialversprödung führt und durch die geringe Größe sowie die hohe Beweglichkeit des Wasserstoffs begünstigt wird.

Da Wasserstoff aufgrund seiner Größe nur schwer direkt nachweisbar ist, wird häufig auf indirekte Methoden zur Studie der Interaktion von Wasserstoff mit der Mikrostruktur zurückgegriffen. Dabei ist die

temperaturgesteuerte Wasserstoffdesorption von besonderer Bedeutung und gut etabliert. Das gemessene Spektrum von Wasserstoffentgasung gegen die Temperatur wird dabei mit Hilfe von Gauss'schen Kurven in mehrere Teile zerlegt, welche spezifischen Mikrostrukturelementen (wie z.B. Korngrenzen, Versetzungen, Ausscheidungen, etc.) zugeschrieben und hinsichtlich ihrer Interaktionsenergie mit Wasserstoff interpretiert werden. Dies verlangt jedoch die Messung des Spektrums mit zumindest drei verschiedenen Heizraten sowie eine genaue Vorkenntnis der Anzahl der zu verwendenden Kurven (also der Anzahl an Mikrostrukturelementen). Weiters wird die Gauss'sche Form der Teilkurven seit jeher kontrovers diskutiert und jedem Mikrostrukturelement wird eine

## SUCCESS STORY

einzelne, mittlere Interaktionsenergie mit Wasserstoff zugeschrieben.

Diese wesentlichen Limitationen sind seit Einführung der etablierten Analysemethode im Jahr 1982 unverändert. Durch disziplinenübergreifende Forschung ist es nun am MCL in Zusammenarbeit mit der Universität Gent (Belgien) und des CD-Labors für Digitale Materialdesign-Richtlinien zur Vermeidung von Legierungsversprödung gelungen, die vorherrschenden Limitationen zu beseitigen. In der zugehörigen Publikation in der Fachzeitschrift *npj materials degradation* (Bild oben) wird die neuartige „Fingerprint“-Methode beschrieben, welche die vollständige Charakterisierung der Wasserstoff-Mikrostrukturinteraktion auf Basis der Wasserstoffdesorptionsmessung einer einzigen Heizrate ermöglicht. Dabei wird ebenfalls die Notwendigkeit von Vorkenntnissen über die genaue Anzahl an Mikrostrukturelementen umgangen. Weiters stellt das Analyseergebnis – der Wasserstoff „Fingerprint“ – eine Verteilung der Wasserstoffinteraktionsenergien dar und ermöglicht somit tiefere Einblicke in das Verhalten von Wasserstoff in Stählen als die bisher gemessenen mittleren Energiewerte. Das Konzept der „Fingerprint“-Methode wurde auf der renommierten Fachkonferenz Steel&Hydrogen (5th international conference on metals and hydrogen) in Gent

–

### Projektkoordination (Story)

Dr. Vsevolod Razumovskiy  
 Head of the Christian Doppler Laboratory  
 Key Scientist Computational Materials Design  
 Materials Center Leoben Forschung GmbH  
 T +43 (0) 3842 45922-532  
[vsevolod.razumovskiy@mcl.at](mailto:vsevolod.razumovskiy@mcl.at)

### Projektpartner

- Materials Center Leoben Forschung GmbH, Österreich
- Ghent University, Belgien
- voestalpine Wire Rod Austria GmbH, Österreich
- Montanuniversität Leoben, Österreich
- voestalpine Tubulars GmbH & Co KG, Österreich

präsentiert und hat dort nach Bewertung einer internationalen Fachjury den Preis für das beste Poster gewonnen.



Best Poster Award für den Dissertanten Philipp Hammer an der Steel&Hydrogen conference 2025 für die „Fingerprint“-Methode. Bild: MCL

### Wirkungen und Effekte

Durch die neu entwickelte „Fingerprint“-Methode können wasserstoffversprödungs-resistente Legierungen schneller und zielgerichteter entwickelt werden, wodurch die Sicherheit von Materialien in Kontakt mit Wasserstoff erhöht und somit ein Beitrag zur Energiewende geleistet werden kann. Gemeinsam mit voestalpine ist ein entsprechendes Patent in Beantragung, das potentiell eine neue Produktgruppe etablieren wird.

### IC-MPPE / COMET-Zentrum

**Materials Center Leoben Forschung GmbH**  
 Vordernberger Straße 12  
 8700 Leoben  
 T +43 (0) 3842 45922-0  
[mclburo@mcl.at](mailto:mclburo@mcl.at)  
[www.mcl.at](http://www.mcl.at)

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMIMI, BMWET und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt ([www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)).