

Pingpongballen als wetenschappelijk instrument

Jilt Sietsma

Inleiding

Bij het begrip pingpongballen denken we niet direct aan wetenschap. Toch wist prof. Willie Burgers, in een tijd waarin zeer beperkte computers nog hele kamers vulden en geen grafische output gaven, sets pingpongballen te gebruiken als wetenschappelijke instrumenten om atomaire structuren te onderzoeken en beschrijven. De pingpongballenmodellen werden gebruikt om aankomende ingenieurs basisbegrippen van structuren in materialen bij te brengen en om wetenschappelijke inzichten daarin te ontwikkelen. Het mooie is dat deze modellen, bestaand uit aan elkaar gelijmde pingpongballen of met veertjes verbonden houten bolletjes, nog steeds gebruikt worden. Met name in het onderwijs werkt het toch veel beter om 3D-structuren in je hand te houden en van alle kanten te kunnen bekijken dan ze op een beeldscherm te zien draaien.

Willie (Willem Gerard) Burgers (1897–1988) was tussen 1940 en 1967 hoogleraar Fysische Scheikunde aan de Technische Universiteit Delft en is één van de *founding fathers* van de afdeling Materiaalkunde. Samen met zijn collega's Druyvesteyn van Natuurkunde en Jongenburger van Werktuigbouwkunde zag hij rond 1950 in dat metalen een zo belangrijke rol begonnen te spelen in technologische ontwikkelingen dat onderzoek en onderwijs in de metaalkunde een plaats moesten krijgen aan de Technische Hogeschool Delft, zoals deze universiteit toen heette. En zo geschiedde: in 1952 werd de Tussenafdeling der Metaalkunde opgericht, die in de afgelopen ruim 60 jaar geëvolueerd is tot de afdeling Materials Science and Engineering van de faculteit Mechanical, Maritime and Materials Engineering (3mE).

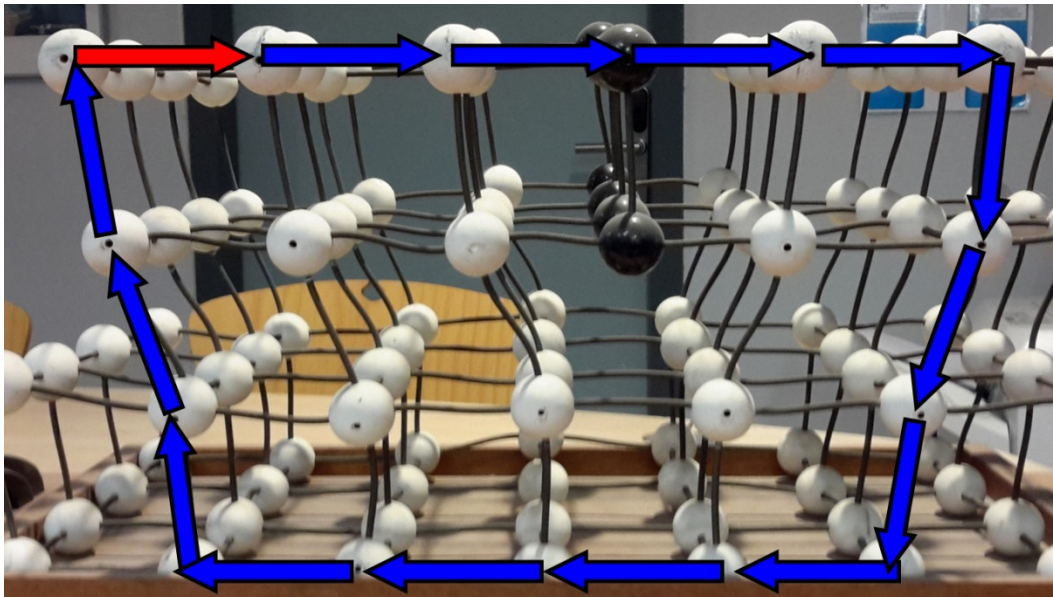
Pingpongballen en atomen

Maar terug naar de pingpongballen. De pingpongballen staan voor atomen. Atomen vormen de kern van alle materialen en zijn daarom van groot belang voor alle technologische ontwikkelingen. De ordening van atomen in een materiaal (de "structuur") bepaalt de eigenschappen van dat materiaal. Een mooi voorbeeld is het element koolstof. Als de koolstofatomen in een gelaagde structuur van zeshoeken geordend zijn noemen we het materiaal grafiet en kunnen we er potloden van maken. We gebruiken het ook als smeermiddel. Als de koolstofatomen in een driedimensionale kubische kristalstructuur gerangschikt zijn, noemen we het materiaal diamant en dat is het hardste materiaal dat ons bekend is. We gebruiken de koolstofatomen dan als schuurmiddel. Beide materialen komen in de natuur voor, maar in de afgelopen decennia zijn ook kunstmatige varianten van koolstof ontwikkeld, zoals fullereen ("*bucky balls*"), nanotubes en grafeen. En dat allemaal op basis van alleen koolstofatomen. Ook voor metalen geldt dat de structuur bepalend is voor de eigenschappen en daarmee voor de toepasbaarheid. Prof. Burgers begreep in de vijftiger jaren heel goed dat wetenschappelijk onderzoek en onderwijs nodig was op het gebied van de metaalkunde om de relaties tussen vormingsprocessen, structuur en eigenschappen van metalen beter te begrijpen, met als doel om metalen met nieuwe en verbeterde eigenschappen te kunnen ontwikkelen. Zijn gelijk werd in die jaren bevestigd

door het oprichten van het grootste pingpongbalmodel ter wereld, het Atomium in Brussel. (Het Atomium stelt de basiseenheid van de kristalstructuur van staal voor: acht ijzeratomen vormen een kubus, het negende atoom zit in het centrum van die kubus. Deze kristalstructuur heet Kubisch Ruimtelijk Gecentreerd.)

Dislocaties

Metalen zijn wat de atomaire kristalstructuur betreft saaier dan koolstof: de meeste metalen hebben de structuur die het Atomium voorstelt (Kubisch Ruimtelijk Gecentreerd) of iets dat daar sterk op lijkt. Toch kun je de eigenschappen van metalen heel sterk beïnvloeden door variaties in de structuur aan te brengen. Zo kan de sterkte van staal alleen al op basis van de "Atomium-structuur" met een factor 10 gevarieerd worden. De essentie ligt dan niet in de eerste plaats in de ideale kristalstructuur, maar juist in de *defecten* in de kristalstructuur, de afwijkingen van de ideale structuur. Anders dan bij voorbeeld in diamant is de vormingsenergie van structuurdefecten in metalen relatief laag en de defectconcentraties zijn daarom significant. Bij een defect kun je denken aan een vacature (een plaats in de structuur waar een atoom ontbreekt) of een korrelgrens (het vlak waarop twee kristallen met verschillende oriëntaties aan elkaar grenzen). Een vacature is een nul-dimensionaal (of punt-)defect, een korrelgrens is een tweedimensionaal defect. Maar in metalen komt ook een heel belangrijk eendimensionaal (of lijn-)defect voor, de dislocatie. Dislocaties zijn cruciaal voor het plastische vervormingsgedrag van metalen en komen voor in grote dichtheden, typisch tussen de 10^{10} en 10^{15} meter dislocatielijn per kubieke meter metaal. Het concept dislocatie was al voorgesteld door Taylor en door Orowan in 1934, maar er bestonden ook in de vijftiger jaren (en zelfs nu) nog vele vragen over het karakter en het gedrag van dislocaties.

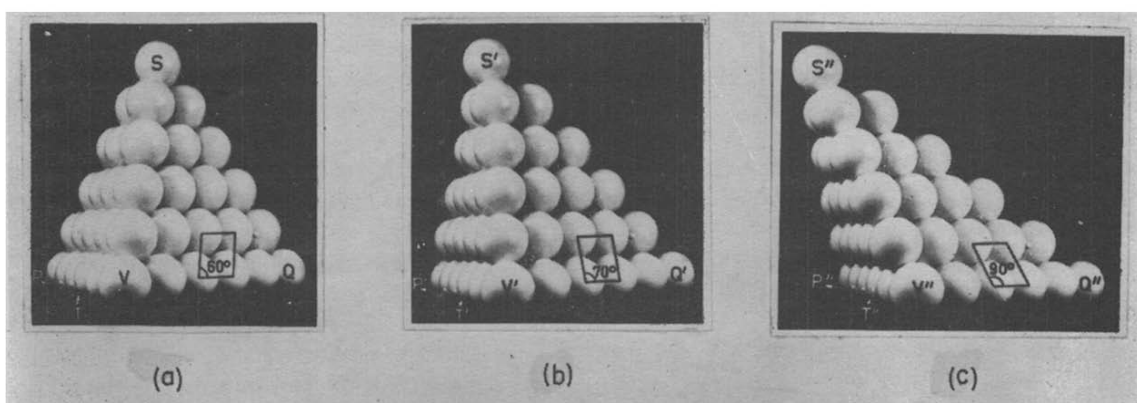


Figuur 1. Een pingpongbalmodel met een dislocatie, een Burgerscircuit (blauw) en de Burgersvector (rood).

Figuur 1 toont het pingpongballenmodel van een dislocatie dat aan vele generaties aankomende ingenieurs heeft duidelijk gemaakt hoe een dislocatie er op atomaire schaal uitziet. De zwarte atomen (die van hetzelfde element zijn als de witte atomen) vormen een "extra halfvlak" en de dislocatielijn is de onderste rand van dit halfvlak. Willie Burgers werkte samen met zijn broer Jan (J.M. Burgers, hoogleraar stromingsleer in Delft) aan het karakter en de karakterisering van dislocaties en de broers Burgers genereerden het meest beroemde Delftse stukje metaalkundige kennis: de Burgersvector. De Burgersvector is de rode vector in figuur 1 en wordt gevonden door op atomaire schaal een rondje (een "Burgerscircuit") te lopen rond de dislocatie: vier atoomstapjes naar rechts, drie naar beneden, vier naar links en drie omhoog. Vanwege de dislocatie kom je dan niet op je beginpunt uit (in een perfect kristal zou dit wel het geval zijn); de vector die eind- en beginpunt verbindt is karakteristiek voor de dislocatie en wordt de Burgersvector genoemd. In deze tijd waarin aantallen citaties zo belangrijk zijn voor wetenschappers, hebben de gebroeders Burgers al lang het derde stadium bereikt: aanvankelijk wordt je werk niet geciteerd omdat andere wetenschappers het nog niet kennen of niet interessant vinden; dat is vervelend. In een later stadium wordt je werk bekender en word je steeds vaker geciteerd; dat is leuk. De meesten van ons bereiken echter niet het derde stadium, namelijk als je werk zo bekend is dat het wel overal gebruikt wordt, maar niet meer geciteerd. Dat geldt bij voorbeeld voor de wetten van Newton en Maxwell, maar ook voor de Burgersvector. Overigens kwam het echte idee voor de Burgersvector van Jan Burgers en Willie noemde zichzelf daarom in de hem kenmerkende bescheidenheid niet de vader, maar de oom van de Burgersvector.

Fasetransformaties

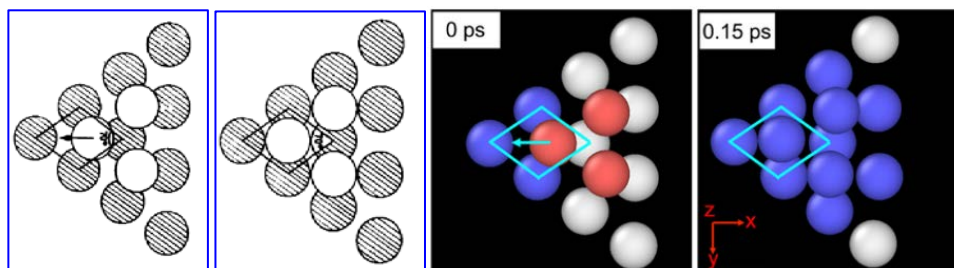
Niet alleen bij het bestuderen van defecten in de structuur speelden de pingpongballenmodellen een rol, ook bij het bestuderen van veranderingen in de kristalstructuur, de zogenaamde fasetransformaties. Figuur 2 is een figuur uit een wetenschappelijk artikel van Willie Burgers uit 1964, waarin te zien is hoe de configuratie, en dus de kristalstructuur, van de atomen verandert.



Figuur 2. Foto's van pingpongballenmodellen in een wetenschappelijk artikel over fasetransformaties in metalen [1].

Een fasetransformatie is bij iedereen bekend als bij voorbeeld het smelten van een vaste stof (van de vaste toestand naar de vloeibare toestand), maar een paar metalen (waaronder ijzer) kennen in de vaste toestand twee fasen, met verschillende kristalstructuren.

Uitwendig zie je de transformatie niet, maar op atomaire schaal wijzigt de structuur wel degelijk. Een belangrijke vraag bij het begrijpen van staal is: hoe brengen de atomen zo'n verandering in kristalstructuur tot stand? Met behulp van de modellen en fantastisch fysisch begrip en inzicht poneerden Burgers en zijn studenten een mechanisme voor de beweging van atomen waarmee de fasetransformatie tot stand komt. Dat fysische inzicht betref de interactie tussen atomen in de structuur die bepalend is voor het thermodynamisch evenwicht en voor de kinetische processen. De beschrijvingen die op deze manier opgesteld konden worden waren echter eerder kwalitatief dan kwantitatief. Mede daarom zijn er nog steeds veel vragen rond het atomaire karakter van fasetransformaties. Naast experimenteel onderzoek worden er nu ook computersimulaties gedaan met Moleculaire Dynamica, waarbij enkele tienduizenden (in grote simulaties enkele miljoenen) atomen interageren via een uit experimenten afgeleide interatomaire potentiaal. Deze potentiaal kan gezien worden als het krachtenveld waarin een atoom zich bevindt, veroorzaakt door de omringende atomen. De daaruit resulterende atombewegingen tijdens een fasetransformatie kunnen in deze simulaties gevolgd worden op de tijdschaal van picoseconden ($1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$). Recente simulaties (zie figuur 3) geven het gelijk van de pingpongballen aan: de fysisch gebaseerde en kwantitatieve simulaties met Moleculaire Dynamica laten zien dat het mechanisme van Bogers & Burgers inderdaad voorkomt als je de atomen de vrijheid geeft om via hun interactiepotentiaal de fasetransformatie tot stand te brengen.



Figuur 3: Atomaire beweging tijdens een fasetransformatie in ijzer. Links het pingpongbalenvoorstel van Bogers en Burgers [1], rechts het resultaat van computersimulaties met Moleculaire Dynamica [3]. Blauwe atomen in de rechterfiguur bevinden zich in de Kubisch Ruimtelijk Gecentreerde kristalstructuur, rode en witte in een andere structuur.

Levend erfgoed

Ook in 2016 staan materiaalkundige docenten met pingpongballenmodellen in de collegezalen en laten de studenten van dichtbij zien hoe atomaire structuren en hun defecten in elkaar zitten. Is dat van belang voor een ingenieursopleiding? Ja, want zowel onderzoekende als ontwerpende ingenieurs baseren hun werk uiteindelijk op het gedrag van atomen in structuren en materialen: wat gebeurt er als ze mechanisch belast worden, als de temperatuur omhoog gaat, als er een elektrisch veld aangelegd wordt, als er een corrosief milieu is? Natuurlijk vangen we dat in macroscopische grootheden zoals de elasticiteitsmodulus of de elektrische weerstand, maar de fundamenteen van deze grootheden liggen in het atomaire gedrag. Eens zal het mogelijk zijn om met een zaal studenten of in een wetenschappelijke discussie met promovendi je *virtual reality* brillen op

te zetten en door een kristalstructuur te wandelen, dan wel achter een bewegende dislocatie aan te rennen bij plastische deformatie, maar zo lang dat praktisch nog niet het geval is blijven we de pingpongballenmodellen uit Burgers' kast halen.

SIETSMA, J.

[1] Bogers, A.J. en W.G. Burgers. *Acta Metallurgica*, 12, 1964, p. 255.

[2] Kolster, B.H. "Willem Gerard Burgers, een 'gentleman scientist' ". In: *Delfts Goud – Leven en werk van achttien markante hoogleraren*. Wakker, K.F. et al., redactie. TU Delft / Bèta Imaginations, 2002, p 182-197.

[3] X. Ou, J. Sietsma en M.J. Santofimia. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 24, 2016, 055019.

SIETSMA, J.

Prof.dr.ir. J. Sietsma is metaalkundige (TU Delft: ir. 1981, dr. 1987), sinds 2009 hoogleraar aan de TU Delft, met leeropdracht *Microstructure Control in Metals*. Zijn voornaamste expertise ligt in de fysische en thermodynamische processen bij de vorming en het gedrag van microstructuren in metallische legeringen. Hij werkt aan de fundamentele aspecten van de productie van metalen en het gedrag van materialen in een breed scala van toepassingen.