

## 鉄材における水素脆化の発生メカニズムと評価

## Mechanisms and Evaluation of Hydrogen Embrittlement in Steel Materials

兵庫県立大・情報（院）\*石野 雄大 兵庫県立大・情報（正）岡本 隆一 兵庫県立大・情報（正）鷲津 仁志

Yudai Ishino\*, Ryuichi Okamoto\*, Hitoshi Washizu\*

\*University of Hyogo

## 1. はじめに

脱炭素の潮流による水素社会の到来によって、液体水素の運送や貯蔵など新たな産業課題の解決が求められている。たとえば、液体水素を運送する際のパイプ継手において、脱着の際の金属摺動部は水素脆化を生じる可能性がある。水素脆化は、鉄系材料において原子状の水素が固体中に入り込み脆化をもたらす。

結晶粒界に関して、材料中に水素を多量に充填させることで粒界破壊が起りやすくなると報告されており、分子動力学計算によると水素によって結晶粒界の凝集エネルギーが低下していることが原因とされている<sup>1)</sup>。また、水素脆性破面は筋模様やフレーク状模様で特徴的な形態をとる<sup>2)</sup>。

本研究では、この課題に対して分子動力学解析を用いて鉄系材料の水素脆化のシミュレーションを行う。鉄表面への水素の吸着挙動については先行研究が多いが、摺動場における反応ダイナミクスの事例は少ないため、これを解析する。

## 2. シミュレーション手法

本研究では、金属の摺動部に鉄と水素分子を挟むような系を用いる (Fig. 1)。分子動力学で用いる力場は、結合の生成/破断、分極を表現することができる Reactive Force Field (ReaxFF)とする。 $(x, y, z) = (26, 26, 60)$  [Å] の周期境界セルの上面・下面それぞれに体心立方格子(bcc)構造の鉄結晶(厚さ 20Å)を配置し、その間に水素分子 81 個を一様に置く。温度 300 K の NVT アンサンブルで、面圧  $P = 5$  GPa、すべり速度 100 m/s で 500 ps の計算を行う。摺動後に上の摺動面を鉛直に引き上げ、その状態について評価する。MD シミュレーションにはオープンのソースプログラムである LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)を用いた。

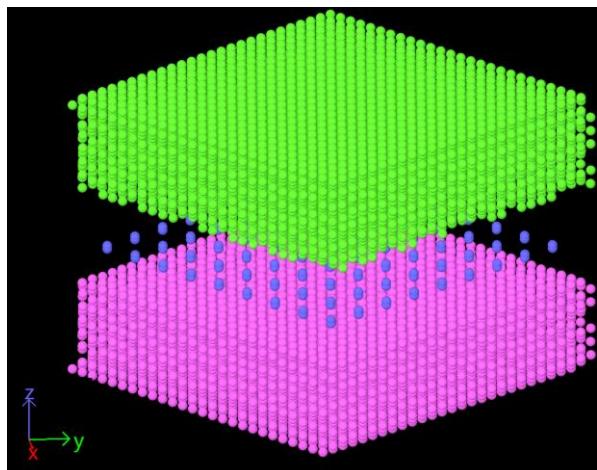


Fig. 1 Initial state of simulation

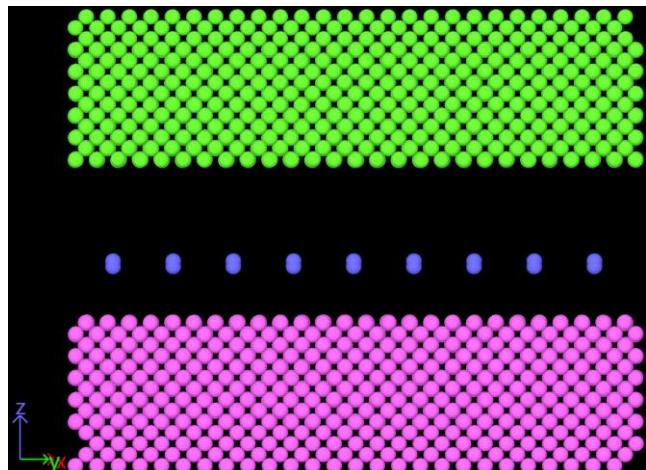


Fig. 2 Initial state of simulation (left side)

## 3. 結果と考察

シミュレーションの結果、右の状態が確認された (Fig. 3)。これは水素原子と鉄の摺動面における反応の一場面である。この図から一様に配置した水素分子は、摺動面において複数のクラスターを形成していると考えられる。

水素分子について、シミュレーション開始より 4 ps 時点において水素分子数が減少し、水素原子が主たる成分へと変質した (Fig. 4)。変質した水素分子はシミュレーション終了時の 500 ps まで変化が現れなかったため、以降について水素原子として扱う (Fig. 5)。

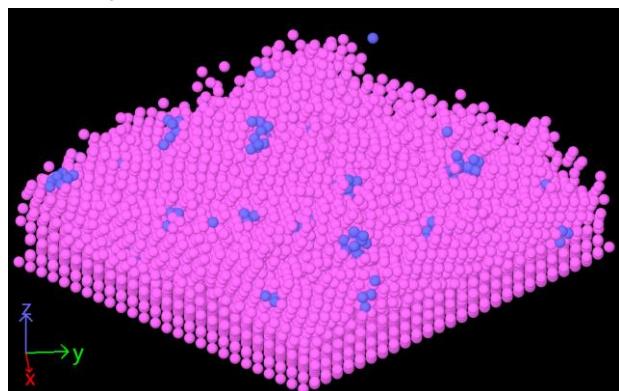


Fig. 3 Snapshot of the sliding surface at 150 ps

水素原子のカットオフ半径を 2.5 とした場合のクラスター数の変化 (Fig. 6) から、時間経過により 30 前後に収束することから水素原子がクラスターを形成していると裏付けられる。

また水素原子について、鉛直方向である Z 軸方向の平均二乗変位について計算を行った (Fig. 7)。グラフは水素原子の開始点を基準にどれほど鉄材に侵入したかに相当し、クラスターの二乗変位が水素脆化に及ぼす影響を考察する。摺動が開始した  $80 \text{ [Å}^2]$  を摺動面における新たな基準とすると、最終的な二乗変位は  $150 \text{ [Å}^2]$  であることから摺動によって平均で約  $8 \text{ [Å]}$  もの原子の侵入が確認された。鉄の系は  $(x, y, z) = (26, 26, 20) \text{ [Å]}$  としているため、表面層から全体の 4 割近い距離だけ水素原子が侵入していると判る。変位について、250 ps を境に緩やかな増加が認められることから、十分な時間経過でおよそ一定に収束すると考えられる。

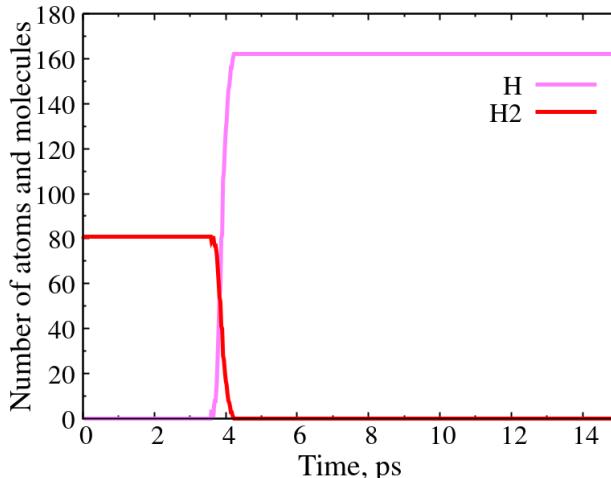


Fig. 4 Time series change in number of atoms and molecules

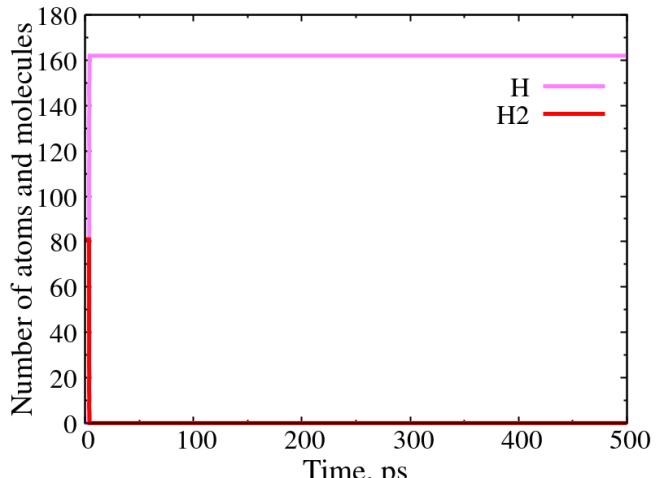


Fig. 5 Time series change in number of atoms (full scale)

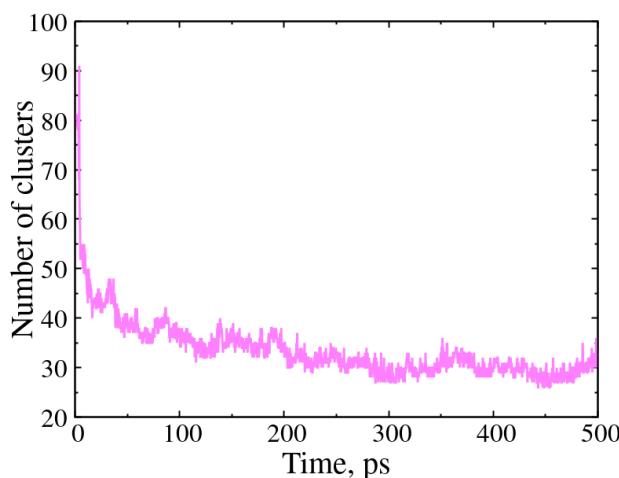


Fig. 6 Time series change in number of clusters

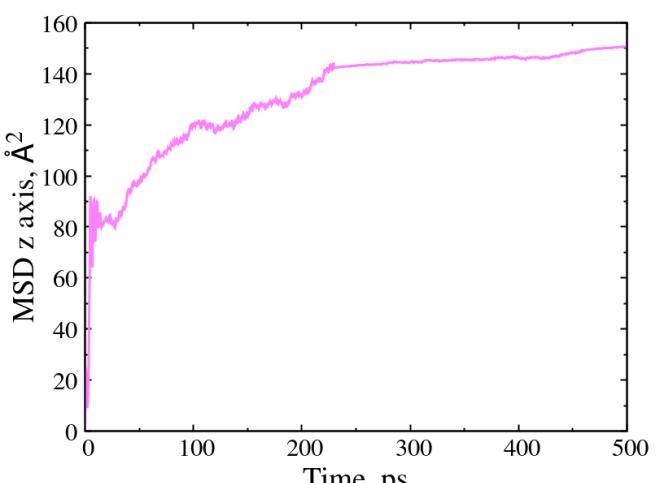


Fig. 7 Time series change in MSD

#### 4. 結言

本研究では、水素分子と鉄材における摺動をシミュレーションにより解析した。時間経過により水素原子は水素原子に変質し、複数のクラスターを形成した。形成されたクラスターは鉄材内部に入り込むことが認められ、これが水素脆化に起因するものであると考えられる。

今後の展望として、摺動後の鉄材について水素を除去した場合の応力評価に取り組む。また同様のシミュレーションについて計算手法を反応力場分子動力学 ReaxFF から、ニューラルネットワーク力場分子動力学 Matlantis へ変更した場合の結果についても解析を行う。

#### 文献

- 三富・岩岡・廣澤：異なる結晶粒径をもつ超微細粒鉄の水素脆化機構、鉄と鋼、108、11 (2022) 865。
- 南雲・宮本：鉄の水素脆性における破壊のミクロ過程とその機構、日本金属学会誌、45、12 (1981) 1310。