

## MultiHy 2014

神鋼リサーチ(株) 宮内 重明

水素脆化に対する高度で産業上適切なシミュレーションの開発を目的として、2011年から欧州でMultiHy (Multiscale modelling of hydrogen embrittlement) プロジェクトが実施された。小職が参加した「MultiHy 2014」はMultiHyプロジェクトの成果報告会であり、2014年10月6～8日、ティディントン (イギリス) で開催された。本報告では「MultiHy 2014」で報告されたMultiHyプロジェクトのトピックスを述べる。

水素脆化とは水素によって金属材料の機械特性 (引張強度、伸び、絞りなど) が低下する現象で、鉄鋼材料 (高強度材)、アルミニウム、チタン、タンタル、ニッケル、マグネシウムで生ずる。また、ある時間経過後に突然破壊が生じる遅れ破壊は、水素脆性のある一面が顕在化した現象であり、外部環境中の水素が材料中に侵入することに起因する。水素脆化・遅れ破壊は構造物の信頼性を損なうため、その防止方法・予測方法の確立が求められている。

MultiHyプロジェクトの具体的な目標は

- ・ 複雑な微細構造を有する先端材料における水素輸送現象の明確化
- ・ 水素と微細組織との相互作用の明確化

である。このため、材料中の水素の輸送現象に注目することにより材料の水素脆化感受性の予測方法を確立して、さらに原子スケールから実部品スケールまでの多重規模モデル (マルチスケールモデル) を開発することが最終目標になっている。このような水素脆化のモデル化には「水素をトラップ (補足) するための原子レベルの拡散障壁」と「材料としての分子集合体モデル (連続体モデル)」との合体がポイントになるが、「モンテカルロシミュレーション」によってその間の乖離を解消することを狙っている。また、このプロジェクトではこれらの成果を適用する具体的な実部品として

- ・ アリアン5型衛星発射ロケットの第1段と第2段の燃焼チャンバーに使用されたバルスメッキしたニッケルの遅れ破壊
- ・ 自動車部品に使用された先端材料 (高張力鋼) の水素脆化
- ・ 風力タービンベアリングの回転接触疲労

の3件が検討されている。

水素脆化の機構としては、

- ・ 格子脆化説 (Hydrogen-Enhanced Decohesion : HEDE)
- ・ 局所塑性変形助長説 (Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity : HELP)
- ・ 吸着誘起塑性変形説 (Adsorption-Induced Dislocation Emission : AIDE)
- ・ 複合機構説 (Hybrid mechanism)

が提唱されている。

このうち、格子脆化説 (Hydrogen-Enhanced Decohesion : HEDE) は遷移金属 (鉄、コバルト、ニッケルなど) に侵入した水素の電子が金属原子の3dバンドに入ることにより、金属原子間の反発力が増加して結晶格子の結合力を低下させるとする説 (水素が金属原子の結合力自体を低下させているとする説) である。この説は、水素中での高強度鋼の亀裂進展試験において、亀裂が進展する水素圧力の限界と応力拡大係数の関係をうまく説明することができる。(注：応力拡大係数：亀裂先端付近の応力分布を表す物理量である。印加応力、亀裂長さから算出されて、この値から亀裂の進展挙動を予測することができる。)

一方、局所塑性変形助長説 (Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity : HELP) は水素

が転位を動きやすくし、亀裂先端の塑性変形を助長するとする説である。金属材料の破壊モードには、「マイクロボイド結合」「疑劈開破壊」「粒界破壊」「粒界割れ」など様々あるが、水素はそれぞれの破壊モードを変化させずに、破壊に至る亀裂長さ、応力を低下させることからこの説が提唱された。

また、吸着誘起塑性変形説 (Adsorption-Induced Dislocation Emission : AIDE) は材料中に侵入した水素よりも、亀裂先端に吸着した水素が金属表面から数原子層の領域にある原子の結合力を低下させて、転位の発生や活動を容易にし、局所的な塑性変形を発生させるとする説である。

さらにこれらの機構が複合した複合機構説 (Hybrid mechanism) が提唱されている。MultiHy プロジェクトではこれらの水素脆化機構は議論されていないが、「MultiHy 2014」では S. Lynch (DSTO) から SEM/TEM 観察による破面状態と水素脆化機構の関係が報告された。また、B. Somerday (Sandia National Laboratories) から吸着説 (AIDE) を補強するトピックスが報告された。彼は、低サイクル疲労では ppm レベルの酸素原子が水素吸着を妨害して、亀裂進展を阻害するとしている。

前述の通り、MultiHy プロジェクトではシミュレーションを中心に検討が進められている。対象となる各スケールとシミュレーションの方法、考慮する金属組織などの関係を図 1 に示す。

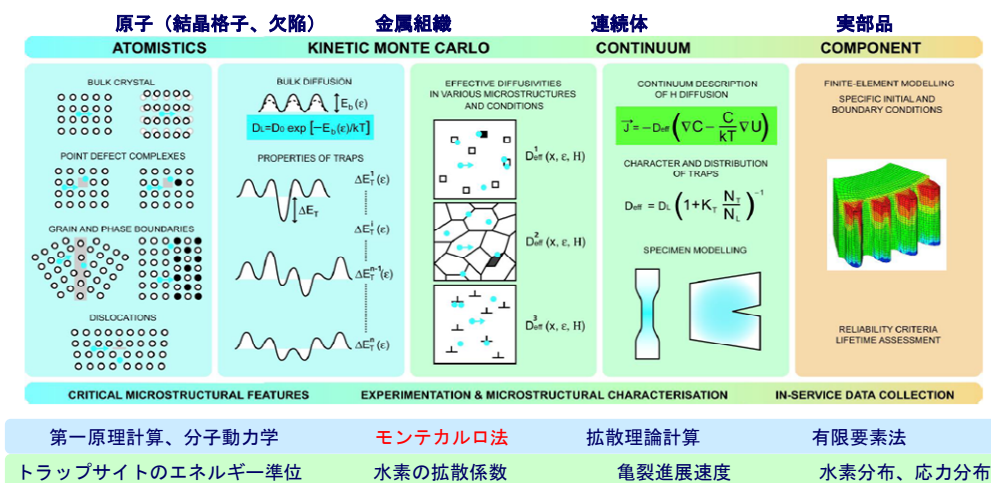


図 1 シミュレーションを適用するスケールと適用された計算方法、結果

結晶格子、欠陥を対象とする原子スケールでは第一原理計算・分子動力学が適用されて、トラップサイトのエネルギー準位が求められる。金属組織のスケールではモンテカルロ法が適用されて、水素の拡散係数が求められる。連続体のスケールでは拡散理論計算、亀裂進展の解析学的計算などが適用されて、亀裂進展速度などが求められる。実部品のスケールではこれらの結果に基づいて有限要素法が適用されて、部品中の水素分布、応力分布などが求められる。

原子スケールから金属組織スケールのシミュレーションとして、M. Mrovec (Fraunhofer IWM) から鉄/炭化チタン析出物近傍の水素トラップのエネルギー準位 (第 1 原理計算)、ニッケル中の水素の実行拡散係数 (粒界を考慮) の計算結果 (モンテカルロ法) が報告された。また、R. P. Gangloff (University of Virginia) から任意の印加応力条件における亀裂進展挙動のシミュレート結果が報告された。彼らはあらかじめ限定された条件で亀裂長さ進展速度と印加応力の関係を精密に測定し、これらの結果から、条件を変えて切れる進

展挙動、寿命を推定できることを示した。

これらのシミュレーションを裏付けるデータの取得方法として、いろいろな測定技術が報告された。

A. Barnoush (NTNU) からナノインデンテーションによる機械特性評価方法が報告された。彼らはナノインデンテーション法と電気化学的な水素吸蔵方法を組み合わせることにより、局所的な水素化物形成など微小スケールでの水素脆化挙動を明らかにすることができるとしている。

また、高井（上智大学）から昇温脱離ガス分析法（Thermal Desorption Spectroscopy : TDS）による水素トラップの同定結果が報告された。水素を吸収した金属材料を加熱、昇温すると、水素トラップ（金属中の欠陥、金属格子間など）に応じた温度で水素が放出される。高井らは通常室温から開始する昇温を-100℃から開始して、従来方法では区別できなかった鉄鋼材料における水素トラップの種類とそのエネルギー準位、捕獲された水素量を明らかにした。

さらに、シミュレーション、測定手法の応用として、N. Croft (Swansea University) からロケットエンジン部品のニッケルメッキ中の水素の拡散挙動が報告された。彼らはニッケルメッキ組織の粒界を反映させた 3 次元モデルを作成して水素の拡散挙動をシミュレーションした結果、水素の拡散が粒界に沿って生じていることを示した。

「MultiHy 2014」に参加した結果、MultiHy プロジェクトでは第 1 原理計算、拡散理論、有限要素法などを組み合わせることにより、原子スケールから連続体スケールまでのシミュレーションがかなりの程度可能になっていると感じた。また、昇温脱離ガス分析法、ナノインデンターなどの新しい測定手法により、材料中の水素濃度、水素トラップの数・分布、微細領域の機械的特性など得られる情報の質・量が飛躍的に増加しているがわかった。これらの情報が、水素脆化機構の解明、シミュレーションの開発にフィードバックされることにより、今後の水素脆化予測・防止技術の発展が見込まれる。

以上