

ニセモノを如何にしてホンモノに近づけるか 水素シミュレーション研究チーム

シミュレーションは模擬することを意味します。実際の物理現象を計算機上で模擬することを試みます。要は可能な限り実際の物理現象に似せることを計算機上で行うわけで、所詮は似せものの作りに過ぎません。ニセモノを如何にしてホンモノに近づけるかに心血を注いでいると言っても過言ではありません。

シミュレーションが今日のように利用されるようになってきますと当然その品質保証が問題になります。現在日本機械学会で行われている計算力学技術者認定事業等は人の面からみた品質保証ですが、ここで問題にしているのは出力されたシミュレーション結果の妥当性を如何にして保証するかということです。解析規模が大規模になればなるほど、これが大変になってきます。

他方、シミュレーション結果の活用方法にはいろいろあり、実際の物理現象との定量的な一致が保証されないまでも、定性的な一致がある程度言えれば、それはそれで実測に対する一つの手助けになる場合もあります。これから紹介する水素シミュレーション研究チームの研究については、実測に対する何らかの手助けを与えることにより、水素材料強度特性研究チーム等が行う実測の負担を多少なりとも軽減することが期待されています。

さて水素シミュレーション研究チームは有限要素法による巨視的な構造解析、水素拡散解析を行うグループと分子動力学を用いた原子レベルでの材料中の水素の挙動を解析するグループから構成されています。九州大学・産総研や京都大学等からの豊富な経験を持つメンバーが連携する形で研究を進めています。

高圧水素環境下における材料の疲労強度特性に着目しますと、材料内の温度や応力分布と材料に侵入した水素の拡散現象の関連性並びにそれに伴う材料中の水素濃度の評価など実証試験において定量的な評価を行うことが難しいものがあります。そこで材料内の温度、応力、時間を因子とした水素の拡散シミュレーションを実施し、水素材料強度特性研究チームの観察結果と比較することで、材料中の水素挙動と疲労き裂進展機構との関連性を明らかにすることに挑戦しています。

いわゆる水素脆化という用語は古くから使用されていますが、水素材料強度特性研究チームの最近の研究成果は従来の格子脆化説は現象の本質を必ずしも正確にとらえていないことを明らかにしつつあり、この問題の解決に水素シミュレーション研究チームの貢献が期待されています。

目次

ニセモノを如何にしてホンモノに近づけるか	P1-P3
研究者紹介	P3-P4
研究支援 G より	P4

前述のように水素脆化メカニズムを説明する代表的な学説として格子脆化説と局所変形助長説が知られていますが、水素材料強度特性研究チームでは後者を有力な説と考えています。そこで有限要素法解析グループでは、局所変形助長説を支持すべくシミュレーションの立場から研究を開始し、X軸対称の半円盤鈍化き裂モデルに対し、水素濃度に依存した降伏条件を適用することにより、静水応力と格子濃度（水素の格子間配位濃度をここでは簡単のため格子濃度と呼びます）、相当塑性ひずみとトラップ濃度（水素の欠陥配位濃度をここでは簡単のためトラップ濃度と呼びます）の関連性を示しました。負荷時間の長短変化（負荷時間速度の大小変化）に対し、静水応力は負荷時間に依存しませんが、格子濃度は負荷時間に大きく依存します（負荷時間が短いと格子濃度は高くなりません）。図1は応力拡大係数 $K_I=40$ [Mpa・m^{1/2}]、初期濃度 $C_{L0}=1$ [ppm]、拡散係数 $D_L=1.27 \times 10^{-8}$ [m²/s]、負荷時間 $t=100$ [s] を基本にした解析結果であり、上段左：静水応力、上段右：相当塑性ひずみ、中段左：格子濃度、中段右：トラップ濃度、下段左：負荷時間による格子濃度変化、下段右：負荷時間による静水応力変化を示しています。

また、静水応力の勾配が大きい（言い換えますとペクレ数が大きい）場合、従来の計算法（ガラーキン法）では負の濃度が生じることがあります。この問題の解決のために安定化法の適用を試み、解決のメドをつけました。これにより、静水応力の勾配の大小に左右されず、水素拡散計算が可能になりました。静水応力の勾配がそれほど大きくない従来のケースではき裂近傍の濃度分布はガラーキン法でも問題なく解けますが、 10^2 倍されたケースでは負の濃度が生じ、安定化法の導入が必要となります。

X軸対称の半円盤鈍化き裂モデルに対し、水素濃度に依存した降伏条件を適用することにより、静水応力と格子濃度、相当塑性ひずみとトラップ濃度の関連性を示した。負荷時間の長短変化に対し、静水応力は負荷時間に依存しないが、格子濃度は負荷時間に大きく依存する（負荷時間が短いと格子濃度は高くなりません）ことを示した。（上段左：静水応力、上段右：相当塑性ひずみ、中段左：格子濃度、中段右：トラップ濃度、下段左：負荷時間による格子濃度変化、下段右：負荷時間による静水応力変化）
 応力拡大係数 $K_I=40$ [Mpa・m^{1/2}]、初期濃度 $C_{L0}=1$ [ppm]、拡散係数 $D_L=1.27 \times 10^{-8}$ [m²/s]、負荷時間 $t=100$ [s]

水素拡散方程式

$$\left(\frac{D^*}{\Delta t} (C_{L_n}^{n+1} - C_{L_n}^n), C_{L_n}^+ \right)_\Omega - \left(\left(C_{L_n}^{n+1} \frac{D_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \sigma_n^n \right), \nabla C_{L_n}^+ \right)_\Omega + (D_L \nabla C_{L_n}^{n+1}, \nabla C_{L_n}^+)_\Omega + \left(C_{L_n}^{n+1} \frac{K_T}{K_T C_{L_n}^+ + N_L} - 29.508 N_T (\epsilon_p^n)^{-5.5} \epsilon_p^{n+1} - \frac{\epsilon_p^n}{\Delta t}, C_{L_n}^+ \right)_\Omega = 0$$

降伏条件式

$$\sigma_Y(\epsilon_p, c) = (\xi \cdot c + 1) \sigma_0 \left(1 + \frac{\epsilon_p}{\epsilon_0} \right)^n \quad (\text{文献 [3]})$$

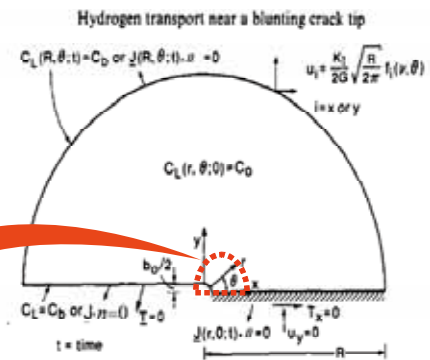


FIG. 2. Description of the boundary and initial conditions for the coupled diffusion and elastic-plastic problems under small scale yielding conditions. Constants C_0 and C_L are given concentrations C_L in NILS. J is hydrogen vector, u displacement and T traction.

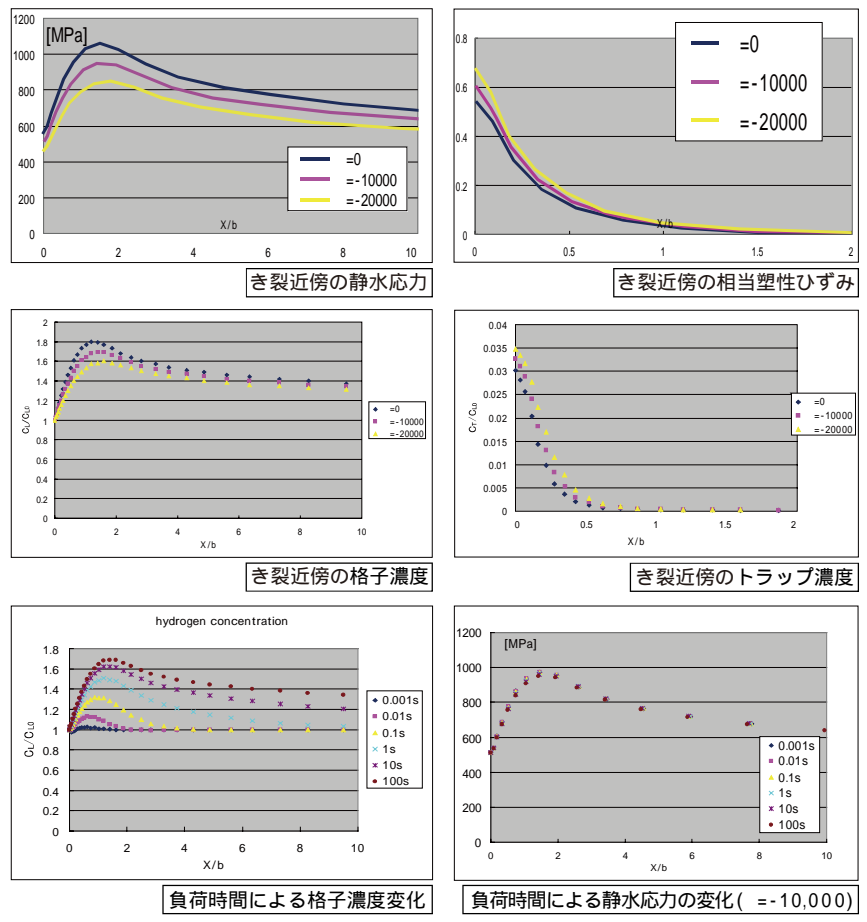


図1 材料内の水素拡散 弾塑性連成シミュレーション

参考文献

- [1] P. Sofronis and R.M. McMeeking, Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip, Journal of Mechanics and Physics of Solids, Vol.37, pp.317-350, 1989.
- [2] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers and A. Bakker, Hydrogen transport near a blunting crack tip, Journal of Mechanics and Physics of Solids, Vol.47, pp.971-992, 1999.
- [3] P. Sofronis, Y. Liang and N. Aravas, Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys, European Journal of Mechanics A/Solids, Vol.20, No.6, pp.857-872, 2001.
- [4] 小竹広和, 松本龍介, 武富紳也, 宮崎則幸, 鈍化き裂まわりの非定常な水素拡散 - 弾塑性連成解析, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.74, No.737, pp.28-36, 2008.

付録

上記の水素拡散解析で用いられた拡散係数のオーダー等は分子動力学グループによって検討されており、BCC 鉄中の水素の拡散係数の温度依存性を示す付図としてまとめられています。有限要素法解析で用いられた常温時の拡散係数のオーダーと符合した拡散係数が推定されていることが分かります。

実際、分子動力学法を用いて BCC 鉄中の水素の拡散係数を平均法を用いて推定したところ、付図のように Heumann et al の結果と一致していることが分かります。計算条件は以下の通りです。

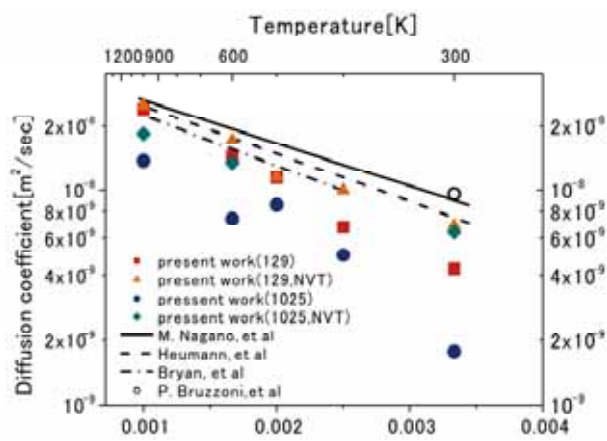
ポテンシャル関数 : Morse [A1]

鉄中に水素原子を 1 個配置

原子数 (鉄 128, 水素 1), (鉄 1024, 水素 1)

グラフ中 NVT と書いてある結果は NVT アンサンブルで計算
圧力約 50 GPa

何も書いていない場合は圧力制御を行い 0 GPa で安定後に計算



付図 B C C 鉄中の水素の拡散係数の温度依存性

- 付図のグラフ中の参照は M. Nagano, Heumann, Bryan [A2], P. Bruzzoni [A3]
- [A1] Igor Ye. Teitchev, Oleg Vinogradov, Comp. Mat. Sci. 36 (2006) 272-280.
- [A2] M. Nagano, Y. Hayashi, N. Ohtani, M. Isshiki, K. Igaki, Scripta METALLURGICA 16 (1982) 973-976.
- [A3] P. Bruzzoni, R. M. Carranza, J. R. Collet Lacoste, E. A. Crespo, International Journal of Hydrogen Energy 24 (1999) 1093-1099.

研究者紹介

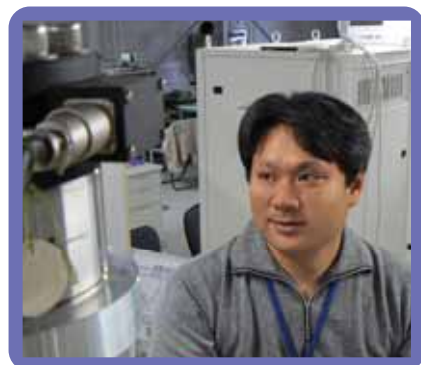
今号では水素材料強度特性研究チームで研究されている 2 人研究者をご紹介します。

井藤賀久岳

私が HYDROGENIUS のポスドクとして働きだして 1 年がすぎました。前職は岐阜県の中日本自動車短大の教員で自動車整備技術やエンジンの基礎等を教えていました。短大でも材料強度に関する研究を行っていましたが、整備士教育を中心とした仕事が多く研究を行う時間は限られていました。この転職をするに当たり、ポスドクとしてやっていけるかという不安はありましたが、HYDROGENIUS や九州大学の充実した研究設備で多くの優秀な研究者の方々と一緒に研究ができることは私にとって大きなチャンスだと思いました。また、家族と一緒に福岡に引っ越すことを賛成してくれたことで転職の決心をすることができました。

HYDROGENIUS では水素材料強度特性研究チームに所属しており、野口

教授をはじめとする固体力学研究室の先生方や学生たちと共同で研究を進めています。現在、主に 1MPa 水素ガス雰囲気疲労試験機を使用し、切欠き材の引張強度特性に及ぼす水素の影響や水素ガス中での遅れ破壊に関する研究を行っています。また、今後はスプリングなどの機械部品への水素の影響に関する試験をすることによって、より実用的な研究を行いたいと考えています。水素やヘリウムなどのガス環境中での試験は、試験準備に手間がかかったり、厳密な試験条件の設定を行う必要があったりと、大気中での試験に比べ実施することは困難ですが、やりがいもあり楽しく研究を行っています。私の行った研究の結果が、金属材料の水素ぜい化メカニズムの解明の一助になるように、これからもがんばっていきたいと思います。



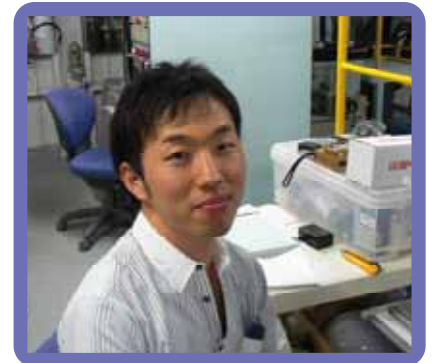
井藤賀久岳
(いとうが ひさたけ)

金崎俊彦

私は、ステンレス鋼の水素脆化に関する研究に従事しています。ステンレス鋼は、スプーンなどの食器類といった身近なところにも多く利用されていますが、燃料電池車、定置型燃料電池、水素ステーションなどの水素の輸送・貯蔵のためのインフラなど、水素エネルギー利用社会を実現するための重要な機器や構造物の材料として注目され、すでに使用されています。水素は金属材料中に簡単に侵入します。侵入した水素は材料の強度を低下させる水素脆化という現象を引き起こします。しかし、高圧水素環境下での十分な強度デ

ータが整備されないまま設計・製造されているのが現状です。そのため、愛・地球博の水素ステーションでの水素漏洩などのいくつかのトラブルが報告されています。事故やトラブルが起きない安全な機器を作るために、本研究センターにある世界最先端の実験設備と分析装置を用いて水素脆化メカニズムの解明と高圧水素環境下での強度データの取得を行っています。私たちのグループで取得したデータをもとに、愛・地球博の水素ステーションの水素漏洩トラブルの原因解明や対策を行いました。今後もステンレス鋼の水素脆化に

関する研究を行うことで、安全な水素エネルギー利用社会の実現に大きく貢献できると確信しています。



金崎俊彦
(かねざき としひこ)

研究支援Gより

イベント / 報告

< 第2回水素先端世界フォーラム開催結果報告 >

2月6日福岡市において、次世代のクリーンエネルギーとして注目を集めている水素エネルギーの研究開発について、その動向や研究成果を発表し相互に情報交換を行う「水素先端世界フォーラム」を、産業技術総合研究所、九州大学、福岡水素エネルギー戦略会議等との共催で開催しました。このフォーラムには、国内はもとより米国カリフォルニア大学・イリノイ大学、英国ロンドン大学インペリアルカレッジなど世界の第一線の研究者の研究発表に加え、米国エネルギー省、米国水素協会、欧州水素協会から水素利用に向けたそれぞれの取り組み状況が紹介されました。水素材料先端科学研究センターからは村上研究センター長(九大理事・副学長)、杉村水素トライボロジー研究チーム長(九大教授)、藤井水素物性研究チーム長が、水素脆化メカニズムの解明、水素環境下における摩擦摩耗の研究、水素物性測定に関する研究発表を行いました。当日の参加者は、日本全国及び海外から約400名となり、各研究発表に対して質疑応答も熱心に行われました。



第2回水素先端世界フォーラム

人事異動

< 平成20年2月1日付 >

牧原正記 (新)水素材料先端科学研究センター副研究センター長
(旧)産学官連携推進部門
関西産学官連携センター 総括主幹

四元弘毅 (新)企画本部総括企画主幹
(旧)水素材料先端科学研究センター副研究センター長

< 平成20年4月1日付 >

藤本勝成 (新)水素材料先端科学研究センター事務マネージャー
(旧)九州経済産業局
鶴丸貴信 (新)九州経済産業局
(旧)水素材料先端科学研究センター事務マネージャー

受賞

< 日本伝熱学会学術賞受賞 >

水素物性研究チームの藤井丕夫氏が日本伝熱学会学術賞を受賞されました。
受賞課題「ナノ加工技術を用いた金属薄膜およびカーボンナノチューブの熱物性計測」

編集後記

爽やかな新緑の季節から梅雨の季節に移り変わろうとしていますが、今年の梅雨は陽性なのか、陰性なのか気になるところです。大雨による災害などが起きないようにと空を見上げて願うばかりです。

HYDROGENIUS ニュース第5号
(2008年6月1日発行)

[編集発行]

独立行政法人
産業技術総合研究所
水素材料先端科学研究センター
〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡 744
URL <http://unit.aist.go.jp/hydrogenius>
TEL 092-802-0260
FAX 092-802-0259



禁無断転載

< 出版番号 AIST06-E00014-5 >