

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03862

研究課題名（和文）ナノ組織を有する機能材料の水素脆化メカニズム解明とその抑制方法の開発

研究課題名（英文）Elucidation of hydrogen embrittlement mechanism of functional materials with nanostructure and development of new methods of inhibiting destruction

研究代表者

西村 憲治（Nishimura, Kenji）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・主任研究員

研究者番号：20357718

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：水素分離膜などに利用されるパラジウムの水素脆化メカニズムについて原子系シミュレーションを用いて調べた。水素化物を起点としたナノスケールで生じる水素拡散、破壊現象に着目した。パラジウム水素化物の状態は水素濃度に顕著に依存し、水素脆化に大きな影響を与えることがわかった。相と相の2相共存状態では初期界面転位の存在により引張強度が著しく低下することが明らかになった。本研究で提案したナノ多結晶化により、2相共存状態が解消された。ナノ多結晶化は水素分離膜の耐久性を向上させることが示唆された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

水素利用機器の安全性において、水素を吸収することにより材料の強度が低下する水素脆化は長年の課題である。本研究の特色は、水素脆化に関する研究がほとんど行われていないパラジウムなどの機能材料の水素脆化メカニズムに注目した点である。パラジウムの水素脆化は水素化物に起因しており、水素濃度と水素化物の関係および水素濃度が材料強度に及ぼす影響について重要な知見が得られた。水素脆化メカニズムの解明により、部材の信頼性を向上させると同時に新規材料開発のための材料設計指針が得られる。

研究成果の概要（英文）：The hydrogen embrittlement mechanism of palladium used for hydrogen separation membranes was investigated using atomic-scale simulations. We focused on hydrogen diffusion and fracture phenomena that occur on a nanoscale starting from palladium hydrides. We found that the state of the palladium hydrides remarkably depends on the hydrogen concentration and has a great influence on hydrogen embrittlement. Our simulations revealed that the tensile strength significantly decreases due to the presence of initial interfacial dislocations in the two-phase coexistence state of phase and phase. Furthermore, it was also found that the two-phase coexistence state is eliminated in the nanocrystal. It was suggested that nanocrystallization of palladium increase the durability of the hydrogen separation membranes.

研究分野：機械工学

キーワード：分子動力学 水素脆化 水素拡散 転位 水素化物 水素濃度 材料強度

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

水素社会の実現に向けて、水素を利用するための機器の開発が国内外で進められている。水素利用機器の開発において、水素脆化への対応は長年の課題である。水素脆化についての研究は、鉄鋼材料などの構造材料に関して数多く行われている。しかし、機能材料を対象とした水素脆化の研究は少なく、そのメカニズムは十分に解明されていない。本研究では、機能材料の一例として水素分離膜などに利用されているパラジウム(Pd)に注目する。Pdの水素脆化はPd水素化物の生成が原因の一つである。Pd中の水素化物は常温常圧において、水素濃度が小さい場合には α 相、大きい場合には β 相が形成される。水素濃度が中程度の場合には α 相と β 相が共存する2相共存状態となる。これまでの研究から、ナノスケールにおいても2相共存状態になることがわかっている。しかし、水素化物が水素拡散におよぼす影響や2相界面近くで生じるナノスケールでの現象の詳細は明らかではない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、水素分離膜などに利用されるPdの水素脆化メカニズムを明らかにすることである。本研究で着目するのは、水素化物まわりで起こる水素拡散、転位の生成・運動、微小き裂の生成・進展などの原子スケールで生じる現象である。これらがどのように関連して、水素脆化を引き起こすのかを解明する。その成果をもとに、ナノスケールで組織を制御したナノ多結晶化により水素脆化を抑制する方法を提案し、その有効性を検証する。これらの成果をもとにして、水素に対する十分な耐久性のある高性能水素分離膜の開発につなげる。

3. 研究の方法

単結晶バルク材の一軸引張り解析により、水素化物が引張り強度におよぼす影響を評価する。水素濃度の異なる系に対して一軸引張りひずみを負荷し、応力ひずみ線図を比較する。また系内の欠陥解析により、転位やき裂などの原子スケールの欠陥と引張り強度の関係を対応づける。

ナノ多結晶バルク材の水素脆化メカニズムを解明する。水素を含むナノ多結晶バルク材に対して一軸引張りひずみを負荷し、応力ひずみ線図を単結晶バルク材と比較する。また引張り強度におよぼす粒界の影響を明らかにする。

薄膜のナノインデンテーション解析により三軸応力下での水素脆化特性を評価する。インデント直下に生じる転位の生成条件が水素拡散によりどのような影響を受けるか調べる。

4. 研究成果

水素濃度が0.1から0.7までのパラジウム-水素系単結晶の引張り強度特性について分子動力学シミュレーションを用いて調べた。図1に水素濃度が0.1のときと0.5のときの応力ひずみ線図を示す。水素濃度が0.1のときは水素を含まない系と同じような傾向を有していた。すなわち、弾性変形のあと急落し弾塑性変形に遷移した。その後はジグザクの曲線となった。水素濃度が0.5のときは、わずかな弾性変形を示した後にはほぼ一定であった。最大応力は、水素濃度が0.1のときと比較して著しく小さく1/10程度であった。図2に水素濃度が0.1のときと0.5のときの初期原子配置を示す。水素濃度が0.1のときは α 相のみであり、水素濃度が0.5のときは α 相と β 相の2相共存状態になることがわかった。ナノスケールにおいてもマクロスケールと同様に、水素濃度による水素化物の状態変化が生じることが確認された。次に、それぞれの水素濃度において生成した結晶欠陥について調べた。水素濃度が0.1のとき、塑性変形は主として部分転位によって生じることがわかった。応力ひずみ線図における応力の急落は転位の生成に対応していた。水素濃度が0.5のときは、引張りひずみを負荷する前の初期状態においても多数の部分転位が存在した。これは α 相と β 相の界面に生成した界面転位と考えられる。この界面転位を起点として塑性変形が進んだために、水素濃度が0.1のときと異なる応力ひずみ線図になったと考えられる。最終状態において生成した転位数は水素濃度が0.1のときの10倍以上であった。以上より、 α 相と β 相の2相共存状態では初期界面転位の存在により著しく引張強度が低下すると結論づけられた。

次に、ナノ多結晶化したときの水素化物の状態を確認した。単結晶中の水素化物は、水素濃度が0.5のとき2相共存状態となるが、ナノ多結晶ではこれが解消され一様な水素分布となった。ナノ多結晶の一軸引張りシミュレーションの結果、ナノ多結晶の引張強度は水素の影響によって低下するが、単結晶ほど顕著ではないことがわかった。

ナノ多結晶体の水素脆化メカニズム解明については十分な知見が得られておらず、現在研究を進めているところであり、今後の課題として残された。

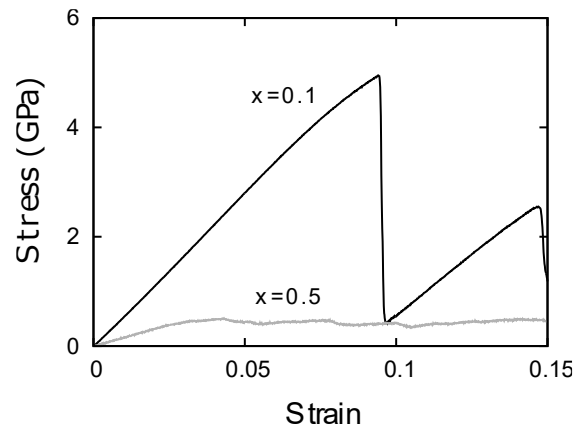


図1 応力ひずみ線図(x:水素濃度)

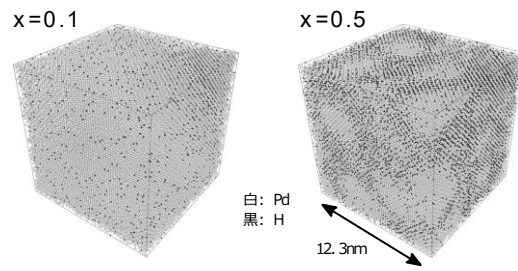


図2 初期原子配置

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 森口詢也, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 MDでの欠陥解析に利用可能な機械学習ポテンシャルの構築
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2020年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kenji Nishimura
2. 発表標題 Molecular dynamics study on defect formation in SiC film
3. 学会等名 The sixth LAMMPS Workshop and Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西村憲治, 三宅晃司
2. 発表標題 分子動力学法によるPdおよびPdAg合金中の水素拡散特性評価
3. 学会等名 日本材料学会第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村祐亮, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 SiCの加工メカニズムに関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本材料学会第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村祐亮, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 分子動力学法によるSiC単結晶の塑性変形挙動の解明
3. 学会等名 日本材料学会第5回材料WEEK
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村祐亮, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 3C-および4H-SiCの結晶欠陥挙動に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 分子シミュレーション学会第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Nishimura, Koji Miyake, and Ken-ichi Saitoh
2. 発表標題 Atomistic insights into defect formation mechanism in single crystal SiC based on molecular dynamics simulation
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 齋藤賢一, 太田直道, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 PeridynamicsとMDの連携によるSiCの弾塑性・破壊シミュレーション
3. 学会等名 日本計算工学会第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 今村祐亮, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌
2. 発表標題 SiCの加工メカニズムに関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2018年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Nishimura's Homepage https://staff.aist.go.jp/k.nishimura/index.html

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------