

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：32601

研究種目：若手研究

研究期間：2022～2023

課題番号：22K14151

研究課題名（和文）HELP理論を用いた水素のモデル化に基づく疲労き裂発生加速機構の解明

研究課題名（英文）Investigation of the mechanism of acceleration of fatigue crack initiation based on modelling the hydrogen using HELP model

研究代表者

蓮沼 将太（Shota, Hasunuma）

青山学院大学・理工学部・准教授

研究者番号：50709764

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,800,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、HELP(水素助長局所塑性変形)理論に基づき水素の影響をモデル化することで、アルミニウム合金の疲労き裂発生に及ぼす水素の影響を解明することを目的とした。本研究では、(1)2次元疲労き裂発生シミュレーションと(2)3次元静的引張解析を行った。(1)では、水素による「転位間相互作用の減少」と「転位の易動度の増加」をモデル化し、2次元転位動力学法に導入した。水素によって疲労き裂発生が加速することが明らかになった。(2)では、3次元転位動力学法に水素による「転位の易動度の増加」を導入した。水素が増加するほど0.2%耐力は減少するが、水素量が一定以上になると減少は飽和することが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

再生可能エネルギーの活用のために、燃料電池自動車や風力発電などに注目が集まっている。これらの機器において問題になるのは、超高サイクル疲労強度に及ぼす水素の影響である。水素により疲労き裂発生寿命は低下するが、そのメカニズムは解明されていない。本研究では、HELP機構、特に水素による転位の易動度の増加により疲労き裂発生が加速することが明らかとなった。また、水素の影響を導入した3次元転位動力学法により、水素による降伏応力の低下を定量的に予測できる可能性が示された。以上のことにより、本研究の成果は燃料電池自動車や風力発電の安全に貢献する。

研究成果の概要（英文）：In this study, the effect of hydrogen on fatigue crack initiation of aluminum was investigated based on HELP(Hydrogen Enhanced Localized Plasticity)model. Two types of simulations were performed in this study. First, 2-dimensional fatigue crack initiation simulation was performed. Two mechanisms of HELP were modeled: reduction of the dislocation interaction stress and an increase of the dislocation velocity by hydrogen. Simulations of the crack initiation were performed by discrete dislocation dynamics with the HELP model. The simulation results indicated that HELP accelerates fatigue crack initiation. Second, 3-dimensional tensile simulation was performed. Increase of the dislocation velocity by hydrogen was modeled and this model was introduced into dislocation dynamics. The simulation results indicated that 0.2 % proof stress was decreased with increasing the hydrogen. However, the decreasing of 0.2 % proof stress was saturated.

研究分野：材料強度

キーワード：水素 疲労 き裂発生 転位

1. 研究開始当初の背景

近年、SDGs(持続可能な社会の実現)に向けて様々な取り組みが行われている。中でも再生可能エネルギーの活用は重要な課題であり、燃料電池自動車などに注目が集まっている。長期使用が想定される燃料電池自動車において問題になるのは超高サイクル疲労強度に及ぼす水素の影響である。燃料電池自動車の高圧水素ガス容器の口金部はアルミニウム合金で製造されている。口金部の二重シール間では空気が湿潤となるが、空気中の水分がアルミニウムと反応し水素が発生することで超高サイクル疲労強度が低下することを研究代表者は明らかにしている。そのため、アルミニウム合金の超高サイクル疲労強度に及ぼす水素の影響を解明することは重要である。しかし、水素が超高サイクル疲労強度を低下させるメカニズムは未だに明らかとなっていない。研究代表者はアルミニウム合金の超高サイクル疲労強度に及ぼす水素の影響を検討してきた。そして、アルミニウム合金の場合、水素により疲労き裂発生寿命が低下し、疲労強度が低下していることが明らかにした。以上のように、水素により疲労き裂発生寿命が低下することが明らかとなっている。しかし、そのメカニズムは明らかとなっていない。

2. 研究の目的

本研究では、HELP(水素助長局所塑性変形)理論に基づき水素の影響をモデル化することで、アルミニウム合金の疲労き裂発生に及ぼす水素の影響を解明することを目的とし、(1)2次元疲労き裂発生シミュレーションと(2)3次元静的引張解析を行った。(1)については、まず、HELPのモデル化、すなわち、転位運動に及ぼす水素の影響のモデル化を行った。転位運動に及ぼす水素の影響として「転位間相互作用の減少」と「転位の易動度の増加」の二つが考えられている。前者については、数値計算により、2つの転位の周りの水素分布を求め、水素による転位間相互作用の減少量を計算した。「転位の易動度の増加」については、先行研究の分子動力学法の結果を用いて水素濃度と転位の易動度の関係を求め、モデル化した。次に、作成したモデルを転位動力学法に導入し、疲労き裂発生シミュレーションを行った。それにより、HELPのメカニズムを検討し、アルミニウム合金の疲労亀裂発生に及ぼす水素の影響を明らかにした。(2)については、水素による「転位の易動度の増加」を導入した3次元転位動力学解析を行った。解析は引張の解析であり、解析結果より応力ひずみ関係を求めた。この応力ひずみ関係より、0.2%体力と水素濃度の関係を定量的に明らかにした。

3. 研究の方法

(1) 2次元疲労き裂発生シミュレーション

転位間相互作用の減少のモデル化

水素による「転位間相互作用の減少」をモデル化するために、図1に示すような2つの刃状転位がある2次元平面を対象に数値解析を行い、水素分布を求めた。その水素分布を用いて水素が転位に及ぼすせん断応力を求めた。そして、転位間距離、転位間角度およびすべり方向差とせん断応力の関係を数式化した。

転位の移動速度の増加のモデル化

水素による転位の移動速度の増加は、Balらが行った分子動力学法解析の結果を基にしてモデル化した。Balによって得られた水素濃度 C_0 と転位の移動速度 v の関係を図2に示す。両者の関係はほぼ直線関係である。 $C_0 = 0.01$ の場合では、水素なしに比べて1.3倍になっている。そのため、 v/v' と C_0 の関係は $v/v' = 30C_0 + 1$ となる。 v' は水素を含まない場合の転位の移動速度である。以上のことから、 $C_0 = 0.01$ の場合、水素のない場合に比べて v を1.3倍にすることにした。また、 $C_0 = 0.1$ の場合、 v を4倍にした。

転位動力学解析

転位動力学法には、元屋敷らの方法を用いた。解析対象は、FCC構造のアルミニウムとした。解析には図3に示すような正方形の二次元試験片を用いた。試験片内部には結晶粒が一つ含まれている。結晶粒の左辺は試験片の表面と同一である。すなわち、結晶粒の左辺は自由表面である。転位が自由表面に達し凹凸が発生、成長す

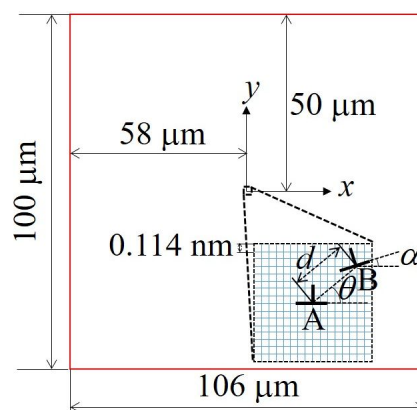


図1 水素分布解析の模式図

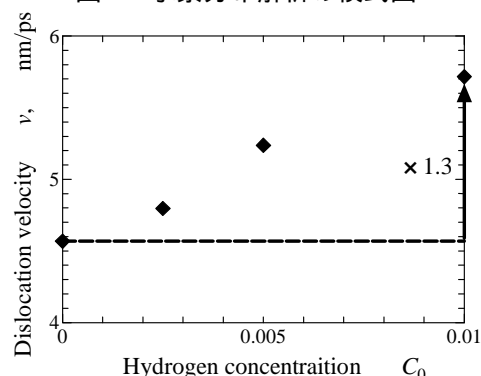


図2 水素濃度と転位速度の関係

ることによって疲労き裂が発生するため、この自由表面に抜ける転位数を比較する。他の3辺は結晶粒界である。荷重条件として、試験片全体にy方向垂直応力を繰返しとして付与している。繰返し荷重は、応力比 $R = -1$ 、周期 $T = 480 \text{ ns}$ 、応力振幅 $\sigma_a = 200 \text{ MPa}$ のサイン波状で付与した。以上の解析を5サイクルまで行った。

本研究では、転位動力学解析に水素の影響を導入した。「転位間相互作用の減少」については、3(1)で作成した近似線から水素によるせん断応力を計算し、分解せん断応力を減少させた。「転位の移動速度の増加」については、3(1)の結果を基にして、水素濃度に依じて v を減少させた。

本研究では、水素の影響を明らかにするために「水素あり」と「水素なし」の2つの解析を行った。「水素あり」では「転位間相互作用の減少」および「転位の移動速度の増加」の両方を導入した。加えて、「転位間相互作用の減少」もしくは「転位の移動速度の増加」のどちらかのみを導入した解析を行った。

(2) 3次元静的引張解析

3次元転位動力学法を用いた引張解析を行い、水素による応力ひずみ関係の変化を検討した。3次元転位動力学法には大規模転位動力学シミュレーションコード ParaDiS を使用した。解析モデルを図4に示す。解析セルの大きさは $3 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m}$ とした。青線で示すのが転位であり、その両端をピン止めることでフランクリード源として作用するようにした。材料はアルミニウム合金 6061 を想定した。初期転位長さ $d = 2.121 \mu\text{m}$ とし、フランクリード源の個数は4個とした。初期転位の分割数は20分割とし、バーガースベクトルの向きは $[101]$ 、すべり面は (111) 面とした。変位条件として解析セルの $[001]$ 方向に変位を与えた。水素の影響をモデル化するため転位易動度を図5のように変化させた。ひずみ速度は $1000/\text{s}$ とした。また本解析では交差すべりを考慮して解析できるように設定した。解析セルの境界は周期境界になっている。

4. 研究成果

(1) 2次元疲労き裂発生シミュレーション

転位間相互作用の減少のモデル化

水素分布の例として、 $C_0 = 0.1$ 、転位間距離 $d = 5.726 \text{ nm}$ 、すべり方向 $\alpha = 0^\circ$ 、転位間角度 $\theta = 60^\circ$ の水素分布を図6に示す。転位の上側では圧縮の静水圧応力が働いているため水素濃度が低くなり、下側では引張の静水圧応力が働いているため水素濃度が高くなっている。図6のように水素分布が転位Aに対して左右非対称の場合、せん断応力は0とならずせん断応力が生じる。水素によるせん断応力と転位間角度の関係の例を図7に示す。 α は 0° である。 θ 、 C_0 、 d が変わると水素によるせん断応力 τ_h が変わることがわかる。このように、 C_0 や α 、 d を変えて解析を行い、それぞれで θ と τ_h の関係を得た。その θ - τ_h 関係をそれぞれ5次式で近似し、転位動力学法解析に導入することで、水素による転位間相互作用の減少をモデル化した。

転位動力学解析

$C_0 = 0.1$ 解析における自由表面に抜けた転位 n とサイクル数 N_c の関係を図8に示す。紫線は「水素あり」の解析結果である。引張時、圧縮時ともに、荷重が増えると表面から抜ける転位が増え、除荷されると転

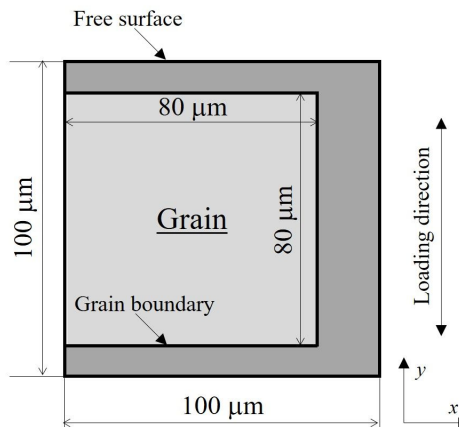


図3 二次元転位動力学解析モデル

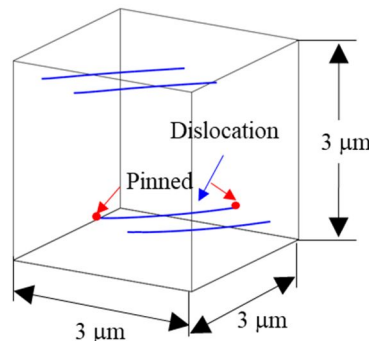


図4 三次元転位動力学解析モデル

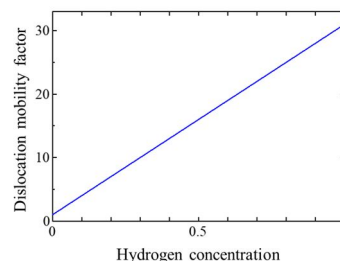


図5 水素濃度と転位易動度の関係

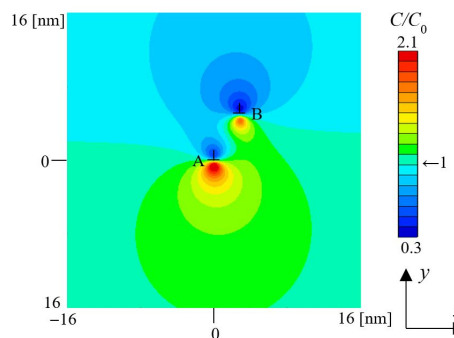


図6 転位周りの水素分布の例

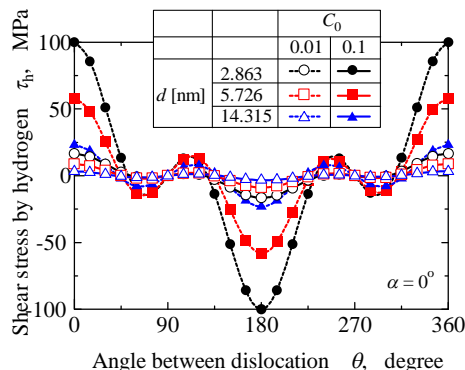


図7 せん断応力の変化

位は表面から抜けなくなる．サイクル数が増えるにつれて表面から抜けた転位数は増えていく．図 8 中の黒線，赤線および青線およびはそれぞれ「水素なし」「転位間相互作用の減少」のみ、「移動速度の上昇」のみの解析結果である．いずれの解析条件でも， n の増加挙動は「水素あり」の解析と同じである．しかし，定量的には異なる．「水素あり」の場合，「水素なし」に比べて n が多い．「移動速度の上昇」のみの場合の n も，「水素なし」に比べて増加している．一方，「転位間相互作用の減少」のみの場合，「水素なし」に比べて n は減少している．「移動速度の上昇」による n の増加量と「転位間相互作用の減少」による n の減少量を比較すると，「移動速度の上昇」の方が大きいことがわかる．

5 サイクル終了後の表面に抜けた転位の数と水素濃度の関係を図 9 に示す．「水素あり」の解析では，水素濃度の増加とともに n は増える．「移動速度の上昇」のみでも水素濃度の増加とともに n は増えるが，「転位間相互作用の減少」のみの場合では水素濃度の増加とともに n は減少する．以上のことから，いずれの場合でも，水素濃度が増えると水素の影響は大きくなることわかる．

以上の解析結果より，アルミニウム合金の疲労き裂発生に及ぼす水素の影響について考察する．本研究のいずれの解析結果においても，「水素なし」に比べて「水素あり」では表面に抜ける転位数が多かった．そのため，水素の存在により HELP が発生することで疲労き裂発生が加速すると考えられる．HELP のメカニズムとして「転位の移動速度の上昇」と「転位間相互作用の減少」の 2 つが考えられる．「移動速度の上昇」のみを導入した解析では「水素なし」に比べて表面に抜ける転位の数は増加していた．一方，「転位間相互作用の減少」のみを導入した解析では表面に抜ける転位の数は減少していた．そのため，転位の「移動速度の上昇」が HELP の主要因だと考えられる．

(2) 3次元静的引張解析

図 10 に各転位易動度における応力ひずみ線図を示した．図 11 に水素濃度と 0.2% 耐力の関係について示す．図 11 に示すように，転位易動度が増加するごとに応力が減少する．水素濃度が 0.1 の時の 0.2% 耐力の減少率はおよそ 43% であり，水素濃度 0.8 の時はおよそ 70% であった．水素濃度が増加するほど減少率は小さくなり，0.2% 耐力の減少は飽和する．

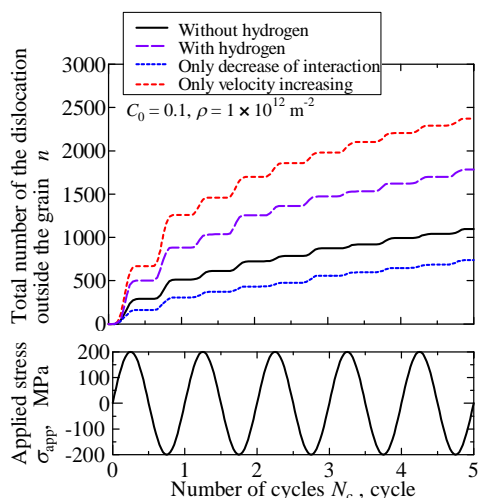


図 8 n とサイクル数の関係

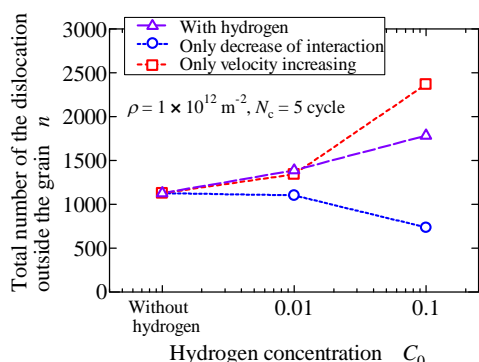


図 9 n に及ぼす水素濃度の影響

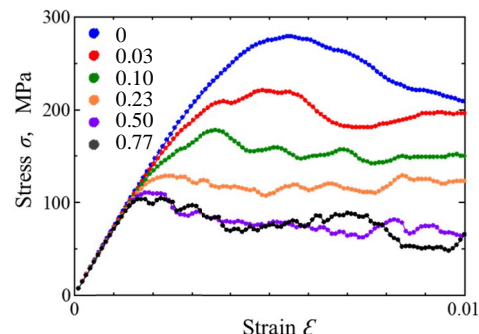


図 10 水素濃度と転位易動度の関係

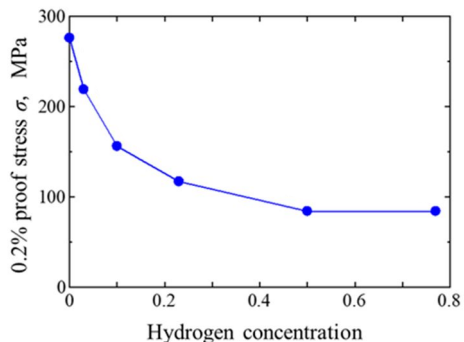


図 11 転位周りの水素分布の例

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hasunuma Shota, Hayase Tomoyuki	4. 巻 176
2. 論文標題 Effect of hydrogen on the dislocation evolution in an aluminum alloy under cyclic loading by two-dimensional discrete dislocation dynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Fatigue	6. 最初と最後の頁 107856 ~ 107856
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijfatigue.2023.107856	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 運沼将太, LIN Junya, 早瀬知行
2. 発表標題 水素の影響を導入した転位動力学法による疲労き裂発生シミュレーション
3. 学会等名 日本材料学会疲労部門委員会第35回疲労シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shota Hasunuma, Junyang Lin and Tomoyuki Hayase
2. 発表標題 Investigation of the Effect of Hydrogen on Fatigue Crack Initiation using Discrete Dislocation Dynamics
3. 学会等名 17th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength and the 13th Conference on Structural Integrity and Failure (国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
---------	---------