

純鉄中の粒界き裂進展に及ぼす水素と転位の影響に関する解析

SATテクノロジー・ショーケース2024

■ はじめに

近年、自動車などの輸送機ではCO₂排出量の削減が求められており、その方法の1つとして車体の軽量化が挙げられる。軽量化の実現のためには重量に対して強度の高い高強度鋼の選択が必要となるが、高強度鋼の使用には荷重が負荷されてからある時間経過後に突然破壊を引き起こす遅れ破壊が問題となっており、遅れ破壊は広義には水素脆化の一例として知られている。水素脆化とは材料内部に侵入した水素が脆化を引き起こす現象である。水素脆化を生じていない材料では、き裂は主に結晶粒内を進展するが、水素脆化を生じた材料では多くの場合、き裂の進展経路が材料内に含まれる欠陥の一つである結晶粒界に沿うことが知られている。また、近年の詳細な観察によると、高強度鋼の遅れ破壊におけるき裂進展経路は完全に結晶粒界面に沿うだけで無く、粒界破面上に塑性変形の痕跡が認められることも報告されており、粒界破壊に及ぼす塑性変形の影響に注目が集まっている⁽¹⁾。そのため本研究は粒界のき裂進展に及ぼす塑性変形の影響を評価することで、将来的に粒界破壊の高精度なシミュレーションに必要な知見を得ることを目的とする。粒界は粒内転位源から射出された転位の集積箇所としても作用することが古くから知られているため、粒界破面上にみられる塑性変形の痕跡は粒内から生じたものと考えられる。そこで本研究では分子動力学法によって純鉄の結晶粒界でのき裂進展シミュレーションを行い、転位を粒界に侵入させることで粒界損傷蓄積を模擬し、さらに粒界にトラップされた水素がき裂進展に与える影響を評価する。

■ 解析方法

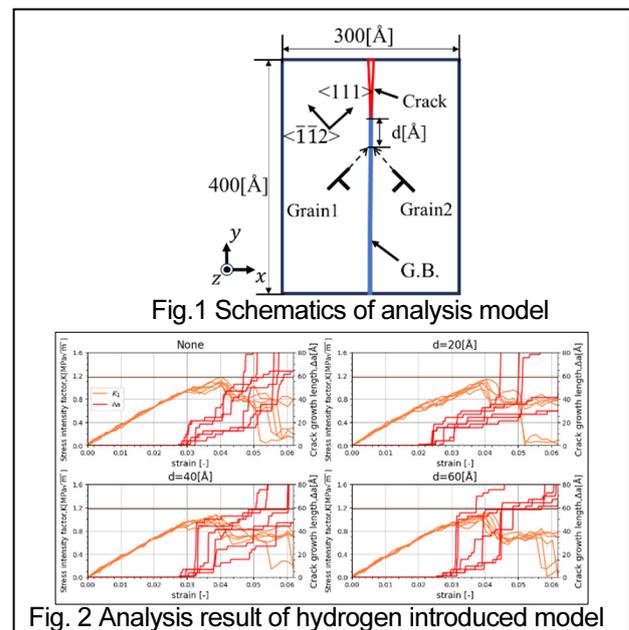
本研究では、解析コードにLAMMPSを用いて分子動力学法による解析を行う。解析対象はBCC構造のFeとし、原子間ポテンシャルとしてWenのEAMポテンシャル⁽²⁾を用いた。図1に解析モデルの概略図を示す。転位侵入モデルは原子を抜き取ることで刃状転位を作成し、き裂先端から長さ $d = 20, 40, 60 \text{ \AA}$ の位置に両側の粒から侵入させる。解析モデルのx方向両端から 10 \AA の範囲内の原子を反対方向に 0.5 m/s で強制変位を与えた引張り解析を行う。初期原子速度と水素の導入位置によるばらつきを考慮するため、6回の解析を行う。水素は粒界近傍に 3.5 atom/nm^2 の濃度で導入する。

■ 解析結果

解析結果の一例を図2に示す。水素を導入したモデルでの解析で転位なし、 $d = 20, 40, 60 \text{ \AA}$ の結果である。橙色の線がき裂進展量 Δa 、橙の線が $K_{Ic} = \sigma \sqrt{\pi a}$ より求めた応力拡大係数である。ヤング率を 200 GPa 、ポアソン比を 0.3 としてグリフィスの条件から求めた臨界応力拡大係数 K_{Ic} の値を黒色の線で示している。すべての解析で下川らの研究⁽³⁾で述べられているような、粒界が転位を射出が観察された。 $d = 20 \text{ \AA}$ では転位がないモデルよりもき裂進展する K_{Ic} の値が $0.2 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ほど低く、 $d = 40, 60$ では大きな差はなかった。このことより、き裂先端に近い粒界に転位が侵入した場合には粒界損傷となりき裂進展を助長することがわかる。また、転位侵入モデルでは転位侵入位置近傍でき裂が一度停留する傾向がみられた。水素を導入していないモデルと水素を導入したモデルの解析結果を比較すると、水素を導入したモデルではサブクラックやマイクロボイドが形成することが多く、一度のき裂進展長さも水素を導入していないモデルよりも長くなる傾向がみられた。

参考文献

- (1) Materials Science and Engineering : A Volume 780,7
- (2) Computational Materials Science, Volume 197,110640
- (3) Acta Materialia, Volume 87, No.1(2015), pp. 233-247



代表発表者 石戸 亮(いしと りょう)
 所属 佐賀大学大学院 理工学研究科
 機械システム工学コース
 問合せ先 〒840-0032 佐賀県佐賀市末広2丁目 1-30
 TEL:080-4698-7479

■キーワード: (1)水素脆化
 (2)分子動力学
 (3)粒界

■共同研究者:武富 紳也(佐賀大学 理工学部)
 萩原 世也(佐賀大学 理工学部)