

TSUBAME 共同利用 平成 25 年度 産業利用 成果報告書

鋼中析出物の水素捕捉能の計算機シミュレーション
Computational simulation of hydrogen trapping at precipitate in steel澤田 英明
Hideaki Sawada新日鐵住金株式会社 先端技術研究所
Advanced Technology Research Laboratories, Nippon Steel & Sumitomo Metal Corporation
<http://www.nssmc.com>

鉄鋼業では、いかに鋼を高強度化するかということに注力してきたが、高強度化が進むにつれて、水素脆化という問題にも対処する必要性が高まってきた。それは、強度が高まるほど水素脆化に対する感受性が高まるためであるが、その対処のために利用されているのが析出物であり、析出物は水素を一時的に捕捉し、後に環境の水素が少なくなった時に捕捉されていた水素を放出することでその役割を果たしている。その水素脆化対策として使われる析出物の 1 つに NbC などの NaCl 型の析出物がある。これまで、TSUBAME 利用によって、析出物 NbC と鉄母相の部分整合界面を計算し、その構造を求めることに成功していたが、今回、その界面での水素捕捉能を調べ、ミスフィット転位から離れた位置に水素が捕捉されやすいことを明らかにした。

So far steel industry has mainly focused on strengthening of steel, however, hydrogen embrittlement has become important subject as strength of steel is enhanced. It is because that steel with higher strength is more susceptible to the hydrogen embrittlement. Precipitates are used to inhibit the hydrogen embrittlement. Specifically hydrogen atoms are trapped at precipitates temporally, and the trapped hydrogen atoms are released when hydrogen concentration in steel decreases. One of the precipitates used to inhibit hydrogen embrittlement is NaCl type compounds. The calculated hydrogen trap energies at the semi-coherent interface between NbC and iron show that hydrogen atom tends to be trapped far from the misfit dislocation.

Keywords: first-principles calculation, order-N method, hydrogen embrittlement, precipitate, steel

背景と目的

鉄鋼材料に要求される特性として特に重要なのは、構造物を維持するための強度であり、それは自動車用鋼板のように衝突時にキャビンを守る強度から、建造物のように長期にわたって構造を保つ強度、ボイラー管などのように高温での安定した強度まで多岐にわたる。そして、鉄鋼業の歴史としては、いかに鋼を高強度化するかということに注力してきた。しかし、高強度化が進むにつれて、水素脆化という問題にも対処する必要性が高まってきた。それは、強度が高まるほど水素脆化に対する感受性が高まるためであるが、その対処のために利用されているのが析出物である。析出物として頻繁に使われているのは、VC などの NaCl 型の析出物であり、水素が大量に鋼中に侵入した際に、析出物で一時的に捕捉し、後に環境の水素が少なくなった時に捕捉されていた水素を放出している。それによって、

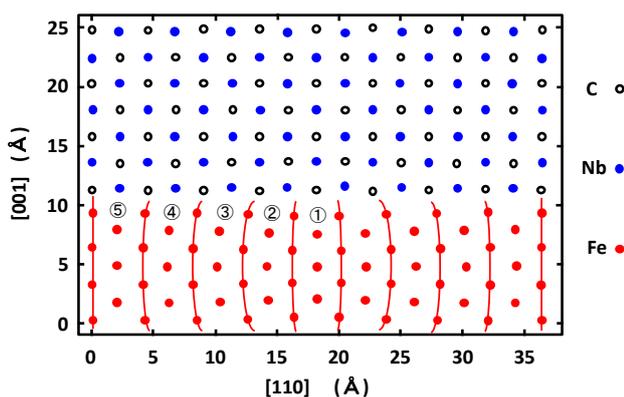
脆性破壊につながる粒界の水素捕捉量を少なくすることが可能となる。しかし、NaCl 型の析出物においても、どこに水素が捕捉されているかは明確には分かっていないために、水素捕捉能を高める方策は不明である他、析出物種による水素捕捉能の違いは分かっていない。そこで、NaCl 型の析出物である NbC と鉄母相との部分整合界面での水素捕捉能を調べることを目的とした。部分整合析出物の界面での水素捕捉能を調べるためには、1000 原子を超えるような部分整合界面を計算することが可能な計算手法と計算機資源が必要である。計算手法については、第一原理計算の大規模化可能なオーダーN 法のプログラム OpenMX (北陸先端科学技術大学院大学尾崎准教授開発) を用い、計算機資源として TSUBAME を利用させて頂き、上記の課題に取り組んだ。

概要

NbC と鉄の部分整合界面での水素捕捉能について、これまでに得ていたNbCと鉄の部分整合界面に対して調べ、整合界面の水素捕捉能と比較した。その結果、部分整合界面は、別途計算した整合界面に比べて、水素を捕捉しやすいことが分かった。また、部分整合界面の箇所では、ミスフィット転位近傍の水素捕捉能が低く、ミスフィット転位から離れたところの水素捕捉能が高いことが分かった。

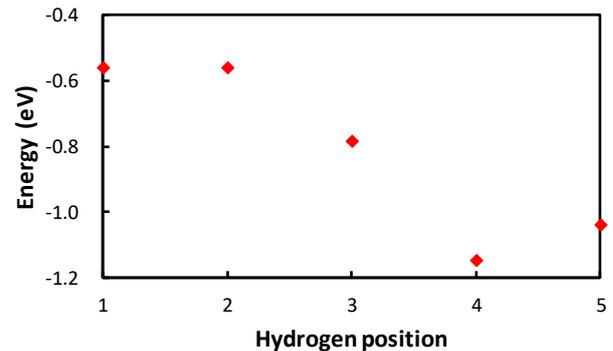
結果および考察

2012 年度までの TSUBAME 利用によって、Baker-Nutting の関係 ((100)NbC//(100)Fe 、 [010]NbC//[011]Fe 、 [001]NbC//[0-11]Fe) にある NbC と Fe の部分整合界面の原子構造の最適化に成功していた。その (110) 面内の原子構造が図 1 であるが、界面近傍の Fe 原子は C 原子と結合するように移動していることが分かる。しかし、中央部分では界面をはさんで Fe 原子 2 個と C 原子 1 個が存在する箇所があり、ミスフィット転位であることが分かる。そこで、ミスフィット転位近傍を含め、図中の①～⑤の位置に H 原子を置き、それぞれの位置での水素のエネルギーを計算した。



(図 1) NbC と鉄母相の部分整合界面の構造と H 原子の配置

その計算結果を図 2 に示す。尚、図 2 では、鉄中の水素のエネルギーをゼロとしており、整合界面の水素のエネルギーは -0.5eV 程度である。結果(図 2)は、①②のような Fe/NbC 界面の炭素原子近傍は水素捕捉能が低く、③④⑤のような Fe/NbC 界面のニオブ原子近傍は水素捕捉能が高いことを示している。



(図 2) NbC と鉄母相の部分整合界面に存在する H 原子のエネルギー

炭化物や窒化物中の水素に対する過去の研究 [Electronic Structure of refractory carbides and nitrides, V.B. Gubanov, A.L. Ivanovsky and V.P. Zhukov, Cambridge Univ. Press (2005) p.160-175] では、水素は炭化物や窒化物中の金属元素と結合し、炭素原子や窒素原子との結合は起こらないと報告されている。今回の析出物界面での水素捕捉能の傾向は、過去の研究の結果と矛盾していない。

まとめ、今後の課題

NbC と鉄の部分整合界面の水素捕捉能について調べ、部分整合界面の水素捕捉能が整合界面に比べて高いこと、部分整合界面の部分ではミスフィット転位から離れた部分の水素捕捉能が高いことが分かった。

但し、本計算の結果、他析出物の水素捕捉能との比較をするためには計算精度を上げる必要があることも分かり、2014 年度には計算条件見直しによって、計算精度を向上させた計算を実施することを検討している。