

Fe-Cr-Niオーステナイト合金の水素固溶度が持つ化学組成依存性の起源の解明

森山, 潤一郎

<https://hdl.handle.net/2324/7363784>

出版情報 : Kyushu University, 2024, 博士 (工学), 課程博士
バージョン :
権利関係 :



氏 名 : 森山 潤一郎

論文名 : Fe-Cr-Ni オーステナイト合金の水素固溶度が持つ化学組成依存性の
起源の解明

区 分 : 甲

論文内容の要旨

金属材料への水素の侵入は著しい材料特性の劣化を引き起こす。この現象は水素脆化と呼ばれ、水素利用の促進を阻む大きな要因となっている。一方、一部の Fe-Cr-Ni 系オーステナイト合金では、水素の侵入によって強度・延性バランスが向上することが明らかになっている。この現象は、合金中の固溶水素濃度上昇に伴ってより顕著となり、水素固溶特性は主要な合金成分である Cr/Ni 量に強く依存することが分かっている。Fe-Cr-Ni 系オーステナイト鋼の水素固溶特性の化学組成依存性の原因を明らかにし、水素による材料特性向上を最大化するには、Cr/Ni 原子と水素原子間の相互作用から現象を理解する必要がある。そこで本研究では、原子間の相互作用を評価するために、第一原理計算を用いて Fe-Cr-Ni 系中への水素原子侵入に必要なエネルギーである水素溶解エネルギーを導出した。これにより、これらの合金のマクロな水素固溶特性が持つ化学組成に対する依存性の指導原理を明らかにすることを目的とした。

1 章では、金属材料に水素が与える影響として、水素による材料特性の劣化（水素脆化）及び水素脆化の基本的なメカニズムについて述べた。次に、BCC 材料および FCC 材料における水素脆化の発生の様子についてその詳細をまとめた。また、主に FCC 材料、特に Fe-Cr-Ni 系オーステナイト合金における水素による特異な力学特性の向上（強度・延性の上昇）について述べた。さらにオーステナイト合金の水素固溶特性について、特に格子間水素の濃度とその分布に対して化学組成が与える影響の観点から整理し、本研究の論点を整理した。

2 章では、第一原理計算を用いて、FCC 構造を持った Fe-Cr-Ni 系の格子間（四面体位置、八面体位置）における水素溶解エネルギーに Cr/Ni 原子が与える影響を検討した。その結果、水素原子は八面体位置において安定し、これを構成する Cr, Ni 原子数の増加に伴って水素溶解エネルギーが線形に減少した。水素溶解エネルギーを弾性エネルギーと化学的エネルギーに分離して評価したところ、Cr/Ni 原子による水素溶解エネルギー減少は電子密度分布変化などに起因する化学的エネルギーの減少によることが明らかになった。さらに、Fe-Cr-Ni3 元系においては、Cr/Ni 原子の水素溶解エネルギーに対する影響が相互に抑制しあうことが示された。

3 章では、2 章で明らかにした Cr/Ni 原子による水素溶解エネルギー変化が Fe-Cr-Ni 系オーステナイト合金のマクロな水素固溶特性に対して与える影響を評価した。まず、Fe-Cr-Ni 系における八面体位置の水素溶解エネルギーを Cr/Ni 原子数の関数として定義することで、各八面体位置における水素占有率を導出した。次に、Fe-Cr-Ni 系において完全にランダムな原子配置を仮定することで、異なる Cr/Ni 原子数で構成された八面体位置の発生割合を計算し、それぞれの水素占有率と組み合わせることで Fe-Cr-Ni オーステナイト合金のマクロな水素占有率を導出して実験値と比較した。その結果、Cr/Ni 量が合わせて 50 at.%を超えても、導出したマクロな水素占有率は実験値とよく一致した。つ

まり、水素固溶特性の化学組成依存性は、Cr/Ni 原子による局所的な水素溶解エネルギー変化に起因することが明らかされた。さらに、Cr/Ni 原子が水素溶解エネルギーに与える影響を 1 つの指標としてまとめ、Fe/Cr/Ni 原子の配列が水素固溶度に与える影響を評価した。その結果、Cr/Ni 原子の均一な分散に伴って水素固溶特性が低下することが分かった。

4 章では、Cr/Ni 原子による水素溶解エネルギー変化について、八面体位置の隙間体積、水素原子周辺の電子密度変化、水素原子周辺の局所的な磁性の変化、オーステナイト相安定度に対する水素の影響から評価した。その結果、Ni 原子増加に伴う局所的な非磁性化が Ni 原子による水素溶解エネルギー減少の原因となる可能性が示された。一方で、Cr 原子による水素溶解エネルギー減少は、局所的な磁気特性の変化からは説明されえないことが明らかになった。Cr 原子による水素溶解エネルギー減少はオーステナイト生成エネルギー変化と強く相関し、Cr 原子近傍の水素によるオーステナイト生成エネルギー減少が Cr による水素溶解エネルギー減少と同等の現象であることが示された。この現象は、Fe-Ni system における Ni 原子による水素溶解エネルギーでも確認され、両原子による水素溶解エネルギー減少は、水素原子によるオーステナイト相安定化に起因することが分かった。

5 章では、2~4 章の結果から、Fe-Cr-Ni 系オーステナイト合金の水素固溶度の化学組成依存性の支配因子とその原因についてまとめた。さらに、この結果から水素による強度延性バランス向上の効果を最大化する合金設計の指針を提案した。