

計算科学で水素を見出す ～アルミ合金水素脆化防止法の開発～

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター
山口正剛

2023年6月1日

自己紹介



- 計算科学研究歴 30年
 - 大学生時代から大型計算機に触れる
- 金属の脆化研究 20年
 - 焼き戻し脆化、水素脆化、液体金属脆化
 - 参考文献（日本語解説）
 - まてりあ、ふえらむ、ATOMOS(アトモス)



ふえらむ15(2010)755.

発明の概要

— 計算（発表者の担当部分） —

- (大型)計算機を用いた第一原理計算から、
- アルミ合金中に含まれる物質のなかから、水素を吸いやすい物質を見つける

— 実験 —

- その物質の含有量を増やすことにより、
- アルミ合金が水素によって脆くなる性質（水素脆化）を抑える

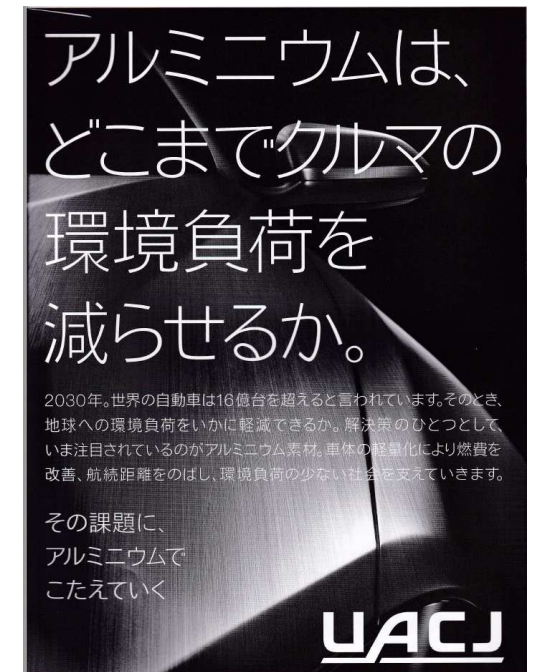
計算科学の方法

- 第一原理計算 (だいいちげんりけいさん)
 - 物質の性質を支配する電子の振る舞いを量子力学で計算
 - 大きい計算機が必要
 - ソフトウェア
 - VASP (有料)
 - 無料ソフトあり



脱炭素社会と金属の軽量化

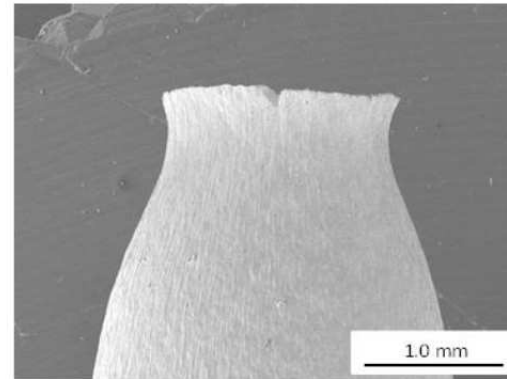
- 地球温暖化防止のため、二酸化炭素（CO₂）排出削減が急務
- 自動車の燃費を向上させたい
 - 車体を軽くしたい
 - **高強度の金属**（アルミ合金等）を使いたい
 - しかし問題が。。。。



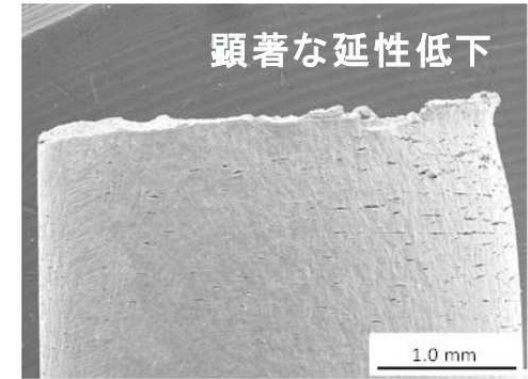
https://www.uacj.co.jp/company/profile/pdf/ad_al_body_01.pdf

金属の高強度化を妨げる水素脆化

- 金属材料が水素を吸収することで、破壊しやすくなる現象
- 航空機や自動車などの高強度金属材料が使われるところで特に問題となる



室温・大気中



室温・高圧水素ガス中

オーステナイト系ステンレス鋼SUS304の低ひずみ速度引張試験 (SSRT試験: Slow Strain Rate Tensile試験)後の破断状況

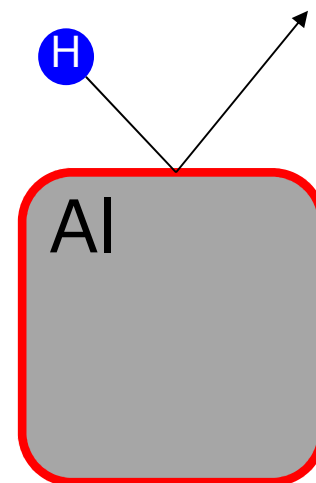
(一社)日本溶接協会原子力研究委員会FQA2小委員会ナレッジプラットフォーム公開資料(2017年):「高圧水素ガス中で使用される部材の水素脆化と強度設計」

九州大学水素エネルギー国際研究センター 山辺純一郎

発明の従来技術との比較

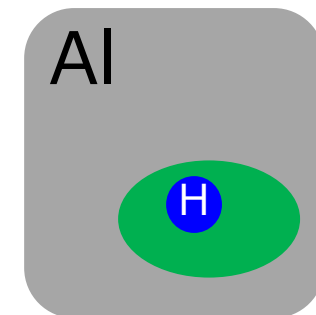
- 従来

- 水素が入るような所では高強度のアルミ合金を使わない

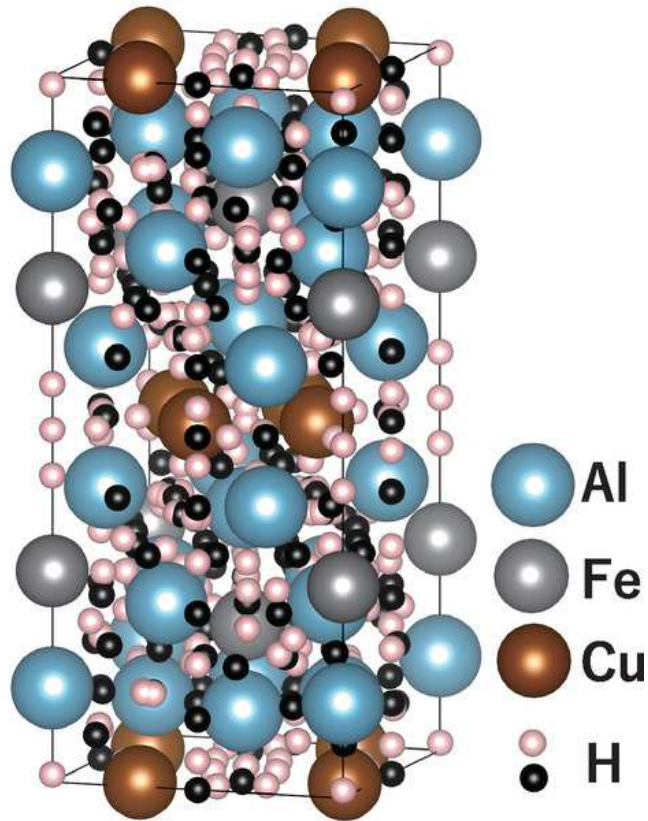


- 今回の発明

- アルミ合金中のある物質が、水素を吸うことを計算で見つけた
- 水素脆化抑止

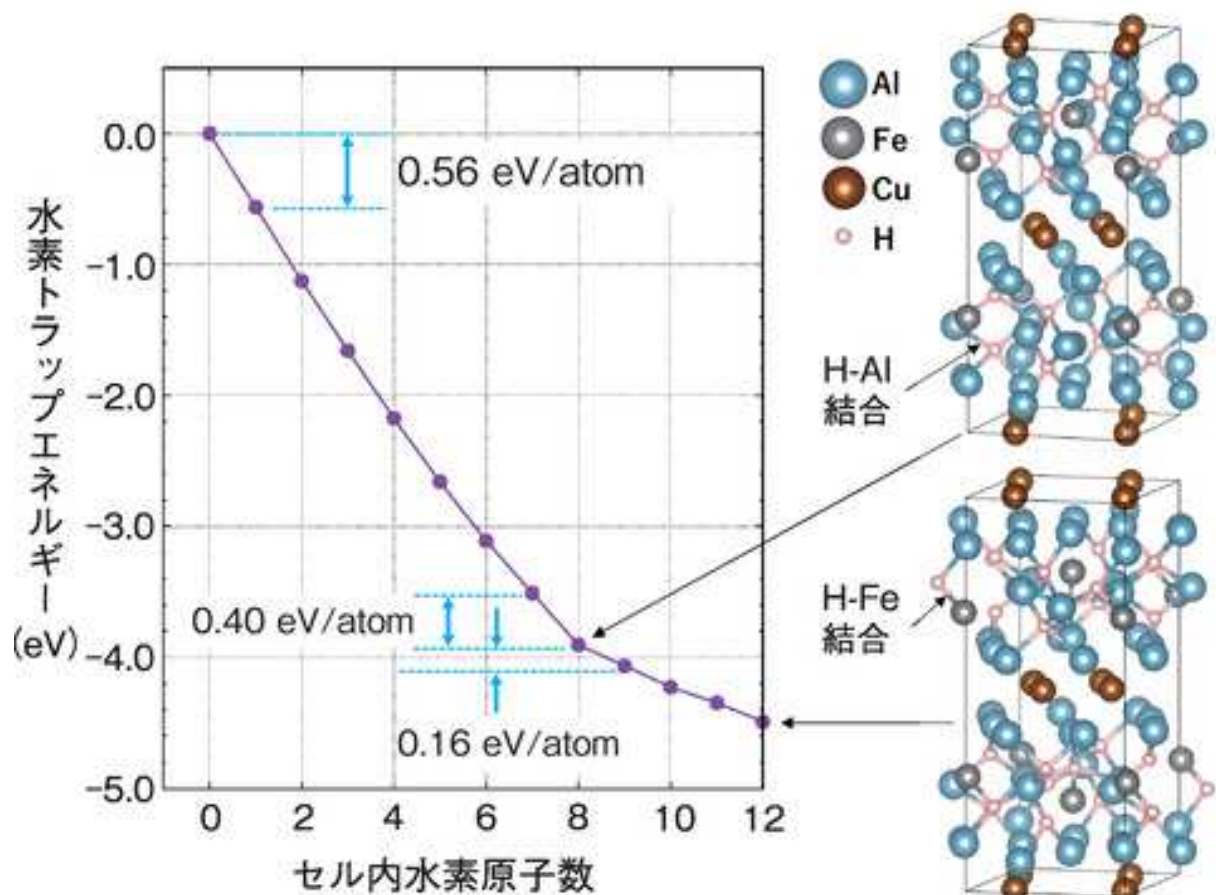


アルミ合金中で水素を吸う物質



- アルミ合金中に含まれる不純物元素から成り、晶出しやすい物質
- この物質が母相アルミから水素を強く吸うことを第一原理計算から見出した。

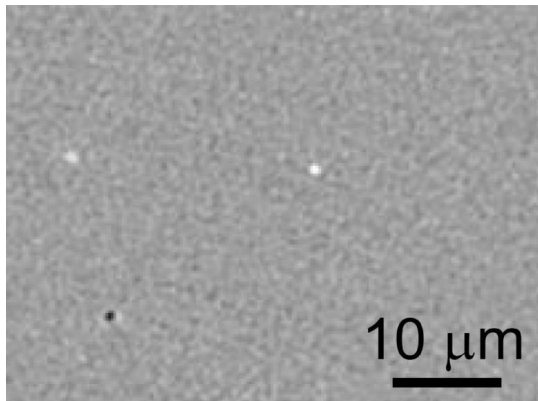
どのぐらい強く、どのぐらいの量を吸うか？



- 0.56から0.40 eV/atomの強さ
- セル中に8個の水素原子
(1nm³あたり13個の水素原子)

実験的検証

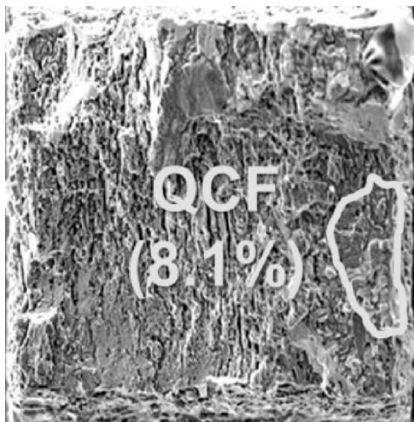
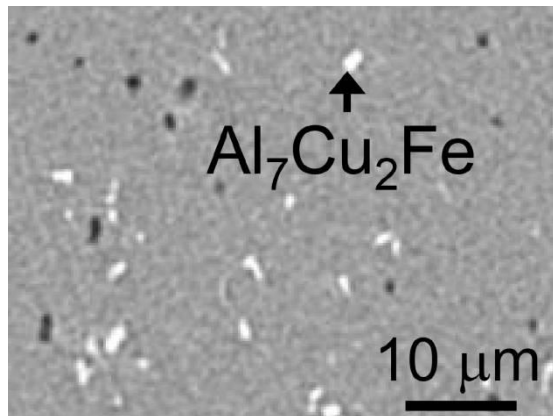
アルミ合金のミクロ組織



破面の様子

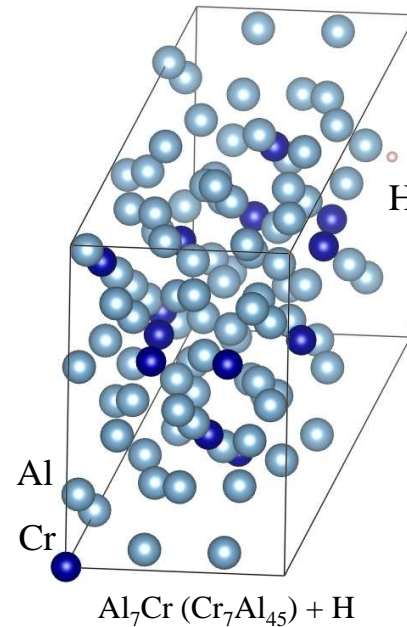
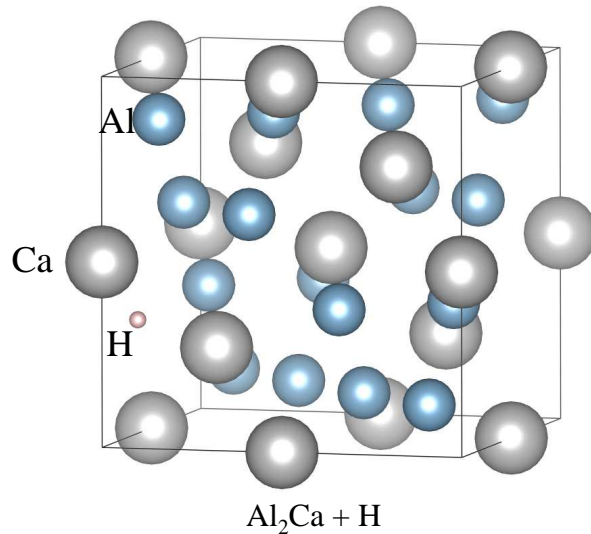
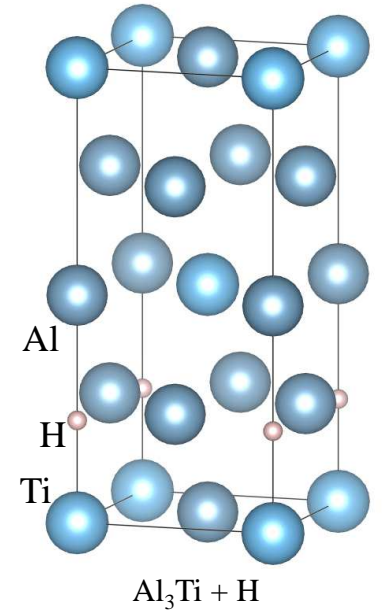
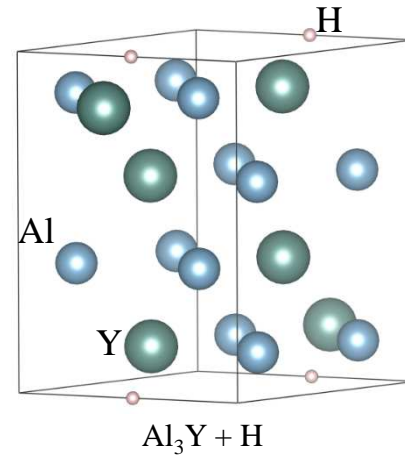
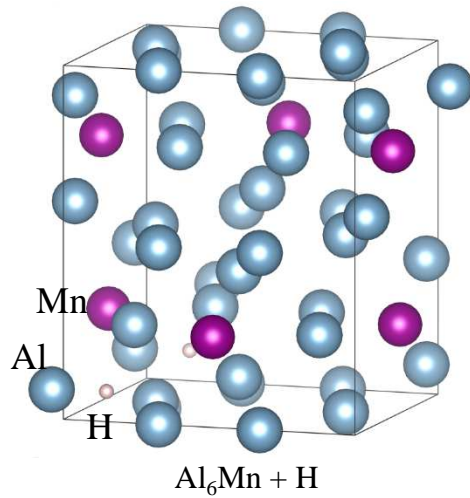
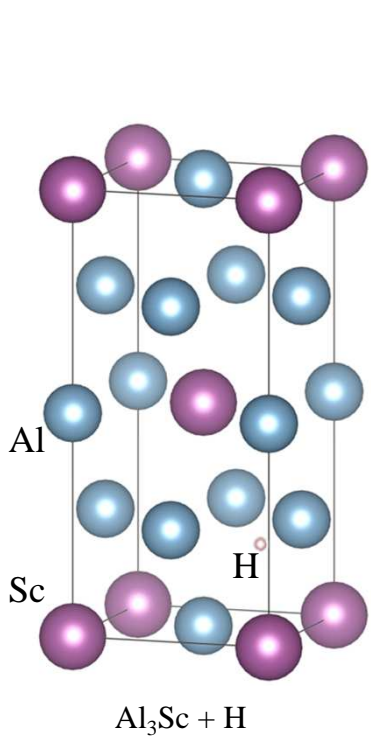


- アルミ合金中で $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ を増やす
- 水素脆化破面 (QCF) が減る



QCF=Quasi Cleavage Fracture
(水素脆化に特徴的な擬劈開破面)

その他、アルミ合金中で水素を吸う物質



- 計算から判明
- 2つめ出願

実用化に向けた課題

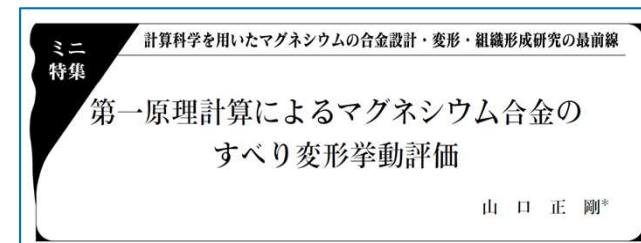
- 実験室レベルでは、アルミ合金の水素脆化防止の効果は見いだされた
- 実用材料、実用環境で水素脆化が防止できるかどうか
課題（企業への期待）
- 水素を吸う物質の種類・形状・密度の調節による水素脆化防止効果の向上
 - 2番目、3番目の特許出願へと続いた

想定される用途

- 自動車等輸送機器の構造部材の軽量化・燃費向上

材料開発における計算科学の活用

- 第一原理計算を使い、指針を得る
 - 材料中で水素がどこに居るか予測
 - その他色々
 - 金属の変形しやすさ予測, etc.



あたりあ56(2017)480.

- 材料開発したい人が自ら計算
 - 様々な試みが必要、手間がかかる
 - 計算専門家支援の下で行えば問題ない

オンラインで計算支援

- Zoom複数画面共有機能
- デュアルモニタ環境
- 同じ(大型)計算機にログイン
- コード&データ共有



本技術に関する知的財産権

- 発明の名称 : アルミニウム合金材およびアルミニウム合金材の水素脆化防止剤
- 公開番号 : 特開2021-188102
- 出願人 : 九州大学、原子力機構
- 発明者 : 戸田裕之、清水一行、山口正剛
- 謝辞 : JST JPMJSK1412 (産学共創ヘテロ構造制御)

- 発明の名称 : アルミニウム合金材の水素脆化防止剤
- 国際公開番号 : WO 2022/270483 A1
- 出願人 : 九州大学、岩手大学、原子力機構
- 発明者 : 戸田裕之、清水一行、山口正剛
- 謝辞 : JST CREST JPMJCR1995

お問い合わせ先

国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構
JAEAイノベーションハブ

T E L 029-284-3420
e-mail seika.riyou@jaea.go.jp