

鉄の腐食（第一原理分子動力学法）

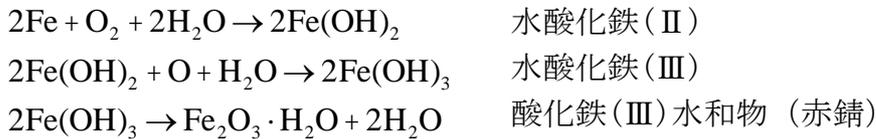
大野 かおる¹, 小野 頌太², 鈴木 勇貴³

1: 横浜国立大学 大学院工学研究院 知的構造の創生部門(ohno@ynu.ac.jp)

2: 横浜国立大学 大学院工学研究院 知的構造の創生部門

3: 横浜国立大学 理工学部 数物・電子情報系学科

高純度の鉄は錆びない。東北大学金属材料研究所の安彦兼次客員教授の研究は有名である[1]。これは、鉄原子が結晶中で規則的に配列していると、水と酸素が存在しても鉄は錆びることはないことを物語っている。鉄が錆びるのは、鉄原子の不規則な配列のためである。鉄がいわゆる赤錆 ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$) になるまでの腐食過程は、次の一連の化学反応によることが知られている[2]：



仮に鉄 2 原子が他よりも飛び出してほぼ孤立していたとすると、その部分に酸素分子が吸着し、さらに水分子が反応することにより、水酸化鉄(II)つまり $\text{Fe}(\text{OH})_2$ 2 量体が出る (図 1a) [3]。水酸化鉄(III) $\text{Fe}(\text{OH})_3$ (図 1b) は、これに酸素原子と水分子が反応して生成される (図 1c, d)。それぞれの反応でスピン磁気モーメントが $8\mu_B$, $10\mu_B$ をとり続けるため、基底状態でのシミュレーションが可能である。CO への段階的水素原子吸着によるメタノール生成反応[4]などの例を交えて、全電子混合基底法に基づく第一原理計算コード TOMBO[5]を用いた結果を紹介する。

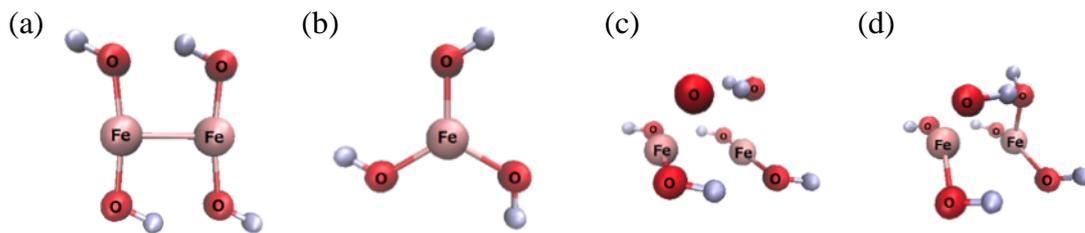


図 1 (a) $2\text{Fe}(\text{OH})_2$, (b) $\text{Fe}(\text{OH})_3$, (c) $2\text{Fe}(\text{OH})_2 + \text{O} + \text{H}_2\text{O}$ の初期配置と (d) 反応途中

References.

[1] <http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/org/research/28.html>

[2] 藤井哲雄「基礎からわかる金属腐食」(日刊工業新聞社, 2011).

[3] 佐田健太郎, 大野かおる, 「全電子混合基底法による水酸化鉄 II の生成ダイナミクス」、日本金属学会(金沢大学, 2013.9.18) 計算科学・材料設計 286.

[4] Nu Pham, K.Kuwahata, S.Ono, K.Ohno, “Hydrogen adsorption reactions of carbon mono-oxide producing methanol”, ACCMS-VO10 (Tohoku Univ., 1 Nov. 2015). PS-19.

[5] S.Ono, Y.Noguchi, R.Sahara, Y.Kawazoe, K.Ohno, Comp. Phys. Comm. **189**, 20 (2015).