

NRIM NEWS



科学技術庁 金属材料技術研究所

National Research Institute for Metals

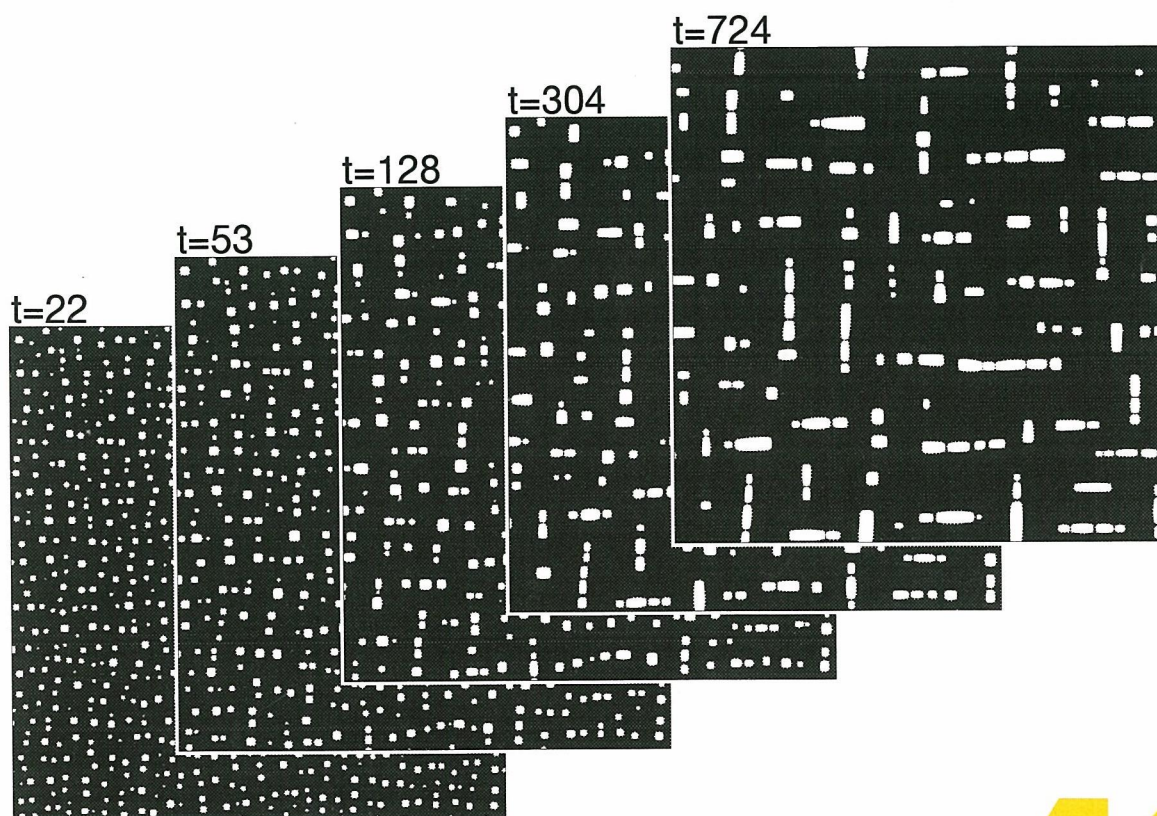


“計算材料科学特集”

- 非均質材料の応力歪み曲線の弾塑性有限要素法による解析
- 結晶欠陥の蓄積を連続体力学でシミュレーションする
- 結晶粒付近の変形とシミュレーション
- フェライト鋼のクリープ強度に及ぼす合金元素の効果

研究最先端

- 溶接部高温ひずみのその場測定



12

1998 DECEMBER

計算材料科学特集

非均質材料の応力歪み曲線の弾塑性有限要素法による解析



極限場研究センター
白石 春樹

現実の材料は純金属ではなく、析出粒子や分散粒子を含む複合材料です。また、非金属介在物などの不純物を含む意味においても複合材料です。複合材料の合金設計や、製造プロセスを合理化する場合、これらの強化粒子や不純物粒子が強度・延性・靱性に与える影響を定量的に評価することが重要です。強度に関してはこれまでも転位論等によりある程度の解析がなされてきました。延性・靱性に関しては現状はすこぶる不満足な状態にとどまっているといわざるを得ません。

最近、計算機能力の増大に伴って構造設計に有限要素法が広く用いられるに至っています。同じ手法が材料特性評価にも用いられるべきです。ここでは、計算時間を考慮して2次元問題に限定し、平板状のマトリクスに円柱状粒子が正方格子をなして、無限に並んでいる場合の応力歪み曲線を評価しました。無限に並んでいる状況は周期境界条件で近似した。

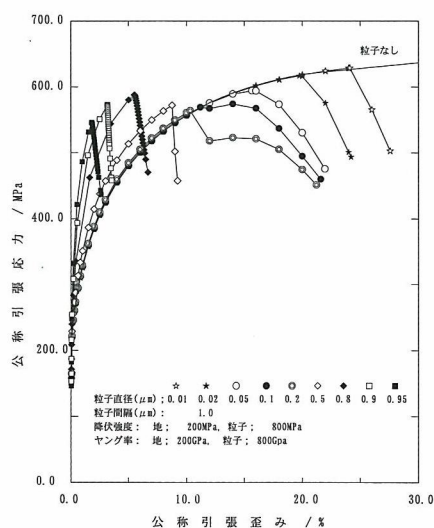


図1 第2相強化粒子を含む材料の応力歪み曲線に及ぼす粒子の大きさの影響

地の構成方程式は、 $\sigma = E\varepsilon (\sigma \leq \sigma_y)$ 及び $\sigma = (\varepsilon_0 + \varepsilon_p)n$ です。

応力歪み曲線に及ぼす粒子直径の影響を図1に示します。粒子が小さいときは強度は変わらないが、均一歪み(塑性不安定点歪み)は粒子が大きくなるとともに低下していきます。粒子がさらに大きくなると流動応力が上昇するが、伸びの低下はさらに著しくなります。図2は粒子直径が0.2 μmの時の計算終了時点における材料内部の歪み分布を示しています。粒子内部は弾性状態にとどまっているので表記を省略しています。材料中には歪みの局所的な集中領域が生じています。このような歪みの局所化が塑性不安定点後の応力歪み曲線の荷重の急激な低下をもたらしているのです。今後、第2相粒子の密度、分散状況のばらつき、粒子強度、地の加工硬化指数などの影響を明らかにしていくことによって、合金設計上の有用な情報が得られるものと期待しています。

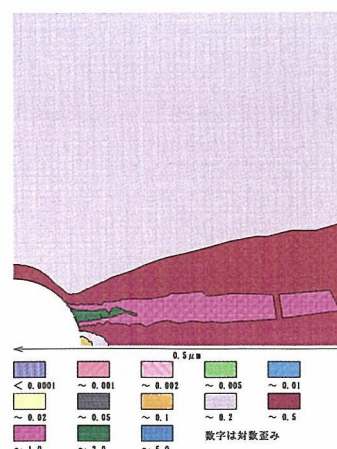


図2 第2相強化粒子を含む材料の計算終了時点における粒子周辺の相当歪み分布
図1の粒子直径0.2 μm、粒子間隔1.0 μmの場合(全伸び値: 21.23%)

計算材料科学特集

結晶欠陥の蓄積を連続体力学でシミュレーションする



材料創製ステーション
大橋 鉄也

金属の表面をきれいに磨いて適当な薬品で処理をした後に顕微鏡で観察すると、最初に見えてくるのが結晶の粒です。金属が変形する時、結晶の中では（多くの場合）あたかも一山のトランプのカードを斜めにずらしてゆくようなモードで変形が起りますが、このようなすべり変形の現象では「転位」と呼ばれる、結晶中の原子の局所的な「配置のずれ」の発生や蓄積・消滅が支配的な役割をはたしていることがわかっています。

結晶を連続体に近似することによってすべり変形で生ずる応力やひずみを数値的に解析することが出来ます。一方、転位はひずみの空間的な勾配に結びついていることが理論的に明らかにされていますので、この理論に立脚して、連続体力学解析の結果から転位の情報を再構築します。

実際に解析した例を図(a)(b)に示します。四角い透明な領域の中に、小さなサイコロ型のグレーに色付けした領域がありますが、外側の透明な領域が母相で、結晶粒のなかの一部を四角く切り取ったと考えてください。その中にあるグレーの領域は母相とは異なる第2相で、この第2相が変態によって体積膨張する場合に母相中に蓄積する転位を計算しました。ただしここでは、第2相の一辺の寸法は $4\mu\text{m}$ で、すべり変形は母相でのみ生ずると言う条件で計算してあります。第2相の周りにいろいろな色のついた線がありますが、これらが計算で求めた転位です。線の長さや太さ、方向や色はそれぞれ

れ、転位の密度と性質を表しています。ここで、赤色と空色は正と負の刃状転位と呼ばれるもので、一方、緑色と紫色は正と負のらせん転位と呼ばれているものです。転位線は本来はとぎれのない連続的な曲線状になりますが、計算では空間を小さな要素に分割しているので、ここではとぎれとぎれの短い線素の集まりで表現されています。したがって、個々の転位線素の位置に厳密な意味があるわけではなく、むしろ第2相の周りに形成される転位の3次元構造の概略がこのようになると考えるのが適切かと思います。

図の(a)と(b)は見る方向を変えて表示したのですが、転位が第2相の周りに8の字状のループ型に、2段重ねで形成されているのがわかります。

転位のイメージはこれまで透過型電子顕微鏡でしか観察する手段がありませんでしたが、今後様々な数値的な手法も利用されるようになってゆくと考えられます。

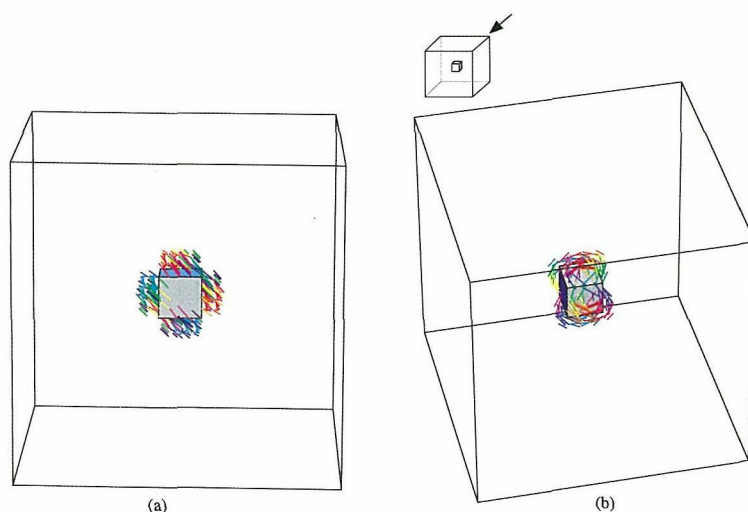


図 結晶中のサイコロ型第2相粒子のまわりに形成された転位

計算材料科学特集

結晶粒付近の変形シミュレーション



計算材料研究部
坂本 正雄

安全で信頼性のある構造物の設計には、材料の強度特性や変形特性、特に力とひずみの関係が重要です。そのため本研究所では、金属材料の疲労特性やクリープ特性についての研究も活発に行われています。金属材料は肉眼では均一に見えますが、微視的にみると様々な結晶方位を持つ微小な単結晶で構成されている多結晶材料です。実用金属の結晶粒の大きさは数 μm から数十 μm であり、この結晶粒の形や大きさは金属の強度に大きな影響を与えています。構造材料として使われる金属の強度や変形を調べるには、微視的なこの結晶粒のふるまいを調べるのが重要です。

そのため私たちは、実験と計算科学を用いて、材料の強度や変形過程について解析的にモデリングする手法を研究しています。これまで、単結晶に適用された転位のセルモデルから応力-ひずみ関係のシミュレーションプログラムを開発し、これを多結晶材料としての実用材料の変形挙動解析に適用し、マクロな変形と微視的な変形について調べてきました。本研究では結晶粒内の局所的なひずみについても実験とシミュレーションからの検討を行いました。図1は実験に用いた市販の純銅の組織写真です。実

用金属はこの図のように多結晶材料であり、その構成要素である結晶粒もけっして均一ではないことがわかります。図1のLine1に沿って実際のひずみ分布を測定した結果が図2(a)に示してあります。結晶粒内のひずみは一律ではなく、明らかにひずみ分布が生じていることがわかります。このことは図2(b)に示した計算シミュレーション結果からも同様な傾向が得られました。計算シミュレーションでは各結晶粒の結晶方位と周辺結晶粒の変形拘束をモデリングしております。このことから実材料の局所的な変形挙動は結晶粒の配置状態やそれぞれの結晶粒の結晶方位により変動することがわかりました。材料の変形は、一見どの場所でも同じように均一に変形しているようにみえますが、微視的にみるとその変形の仕方は場所によって異なります。材料の変形が、このような微小な変形つまり、局所的に生じている結晶粒個々の変形特性や結晶粒同士の力学的な相互作用によって変化することを実験とシミュレーションで示しました。このようなモデリング手法を用いて、材料の内部の変形過程など実験で測定が困難な領域の特性をシミュレーションで予測することが期待できます。

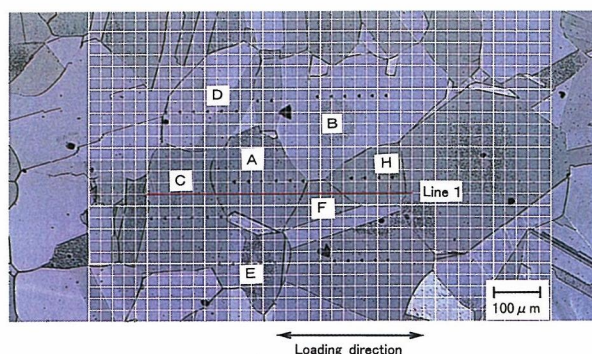
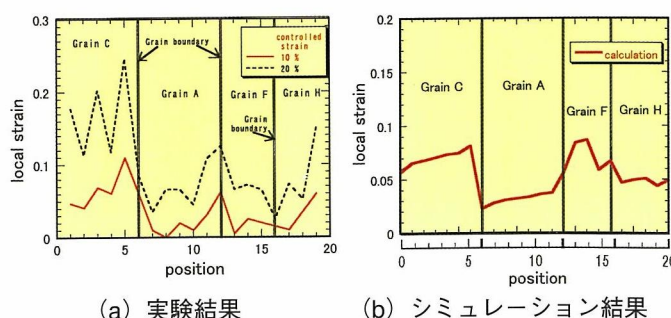


図1 純銅表面の組織写真(実用材料である多結晶体の特徴である粒径、方位などの不均一性が見られる。)



(a) 実験結果

(b) シミュレーション結果

図2 局所的なひずみの分布(実験結果と良く似た傾向がシミュレーションからも得られている。)

計算材料科学特集

フェライト鋼のクリープ強度に
及ぼす合金元素の効果計算材料研究部
阿部 太一

長時間クリープ強度は、発電プラントなどで使用される高温構造部材にとって重要な特性であり、10万時間クリープ破断強度が火力発電用ボイラーの設計基準の一つになっています。当研究所では、金材技研クリープデータベースを用いてフェライト系耐熱鋼の長時間クリープ破断寿命を解析した結果、高温下での微視組織変化によりクリープ変形抵抗は時間とともに低下し、最終的に安定した金属組織と対応する強度レベル（クリープ基底強度）に到達することを見いだしました。私達は、このクリープ基底強度の支配因子を明らかにするため、フェライト鋼の長時間クリープ強度に及ぼす固溶元素の効果に関する研究を行っています。

これまでに、炭素鋼のクリープ破断寿命が単純に各合金元素の固溶量に依存するのではなく、Mo-CやMn-Cなどの原子対濃度と高い相関があることを報告しました。図1は、炭素鋼中に含まれるMo-C及びMn-C対濃度から求めたクリープ破断寿命の予測値を合金中のMo量に対してプロットした図で、Mo添加による強度上昇が極微量（約0.03mass%）で飽和することを示しており、実験事実と良く一致しています。

本研究では、クリープ変形に及ぼす種々の原子対の寄与を定量的に明らかにすることを目的として、3種類のFe-M-C(M=Mn,Mo,Cr)三元系フェライト単相合金のクリープ試験を行ないました（図2参照）。最小クリープ速度はFe-C合金が最も速く、ついでCr添加材、Mn添加材、Mo添加材の順に遅くなり、フェライト相の高温強度改善にはMo添加が最も効果のあることがわかりました。また、応力急変試験の結果、転位の自由飛行運動を示す瞬間塑性ひずみが

観察され、クリープ変形の律速過程は転位のすべり運動ではなく、転位が上昇運動により消滅する回復過程であることが確認されました。そこで、転位の上昇運動速度に及ぼす原子対の効果について検討するため、固溶元素の拡散速度とM-C間の結合の強さを考慮したモデル計算を行った結果、転位の上昇運動を遅らせる効果は、結合力の最も大きいMo-C原子対の場合に最大となり、実験結果を良く説明することができました。

本研究の結果、固溶体中で固溶原子は完全にランダムに分布しているのではなく、特定の原子対の濃度が高くなる短範囲規則構造が存在し、フェライト鋼の長時間側での強度を支配していることがわかりました。原子対による固溶強化の観点からフェライト鋼における母相の組成を最適化することにより、長時間寿命の更なる改善が期待されます。

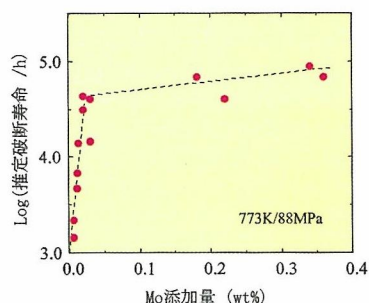


図1 推定破断寿命とMo添加量の関係

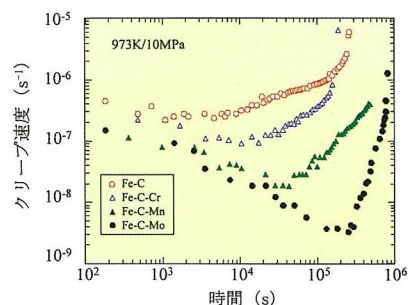


図2 クリープ速度に及ぼす添加元素の影響



構造体化ステーション
村松 由樹

溶接部高温ひずみのその場測定

—レーザースペckルひずみ測定法の新しい応用—

金材技研では21世紀に向けて強度・寿命を飛躍的に向上させた溶接用鋼材を開発しつつあります。この新しい鋼材で優れた溶接継手特性を得るには応力・ひずみなどの溶接部の力学的な情報を正確に取得することが不可欠です。溶接部に発生する低温割れや疲労破壊に関しては冷却後に構造物に内在する残留応力分布、高温割れについては溶接金属の凝固直後からのひずみ履歴が支配するといわれています。また残留応力の主たる発生原因も熱に起因するひずみです。しかし、溶接部は一時的にせよ1000℃以上の高温に曝されるため、これまでの接触的な方法では高温から室温に至るひずみ履歴を実測することは困難でした。

そこでレーザースペckルひずみ測定法をこの問題に応用することを考えました。この手法は材料表面に照射したレーザービームが乱反射して、相互干渉によりセンサー上に生じた干渉模様が物体の変形に応じて変化することを利用してひずみを測定するもので、非接触かつ高応

答性、高精度という特性をもっています。溶接部のひずみ測定に応用したのは金材技研が最初です。

図1に測定の概要を示します。図では薄い鋼板の表面をアークで加熱し裏面にレーザーを照射してその位置のひずみを測定していますが、現在アーク側（表面側）のひずみも測定できるように準備中です。センサーはそれ自身の上にできた干渉模様の変化を連続的に捉えてデータロガーに記録して、実験後にひずみに換算します。得られた結果の一例を図2に示します。図は表面側の入熱により裏面まで鋼板が局部的に溶融・凝固したときの裏波表面のひずみの時間的变化を表したものです。溶融・凝固を経過して1000℃以上の高温から低温までの広範囲のひずみを測定することができました。図は相変態のないオーステナイト系ステンレス鋼の場合ですが、相変態のある一般の鋼の場合も確実にひずみ挙動を捉えることができました。今後、実際の溶接に広く適用し、数値解析と併用して残留応力分布の推定などに役立てたいと考えています。

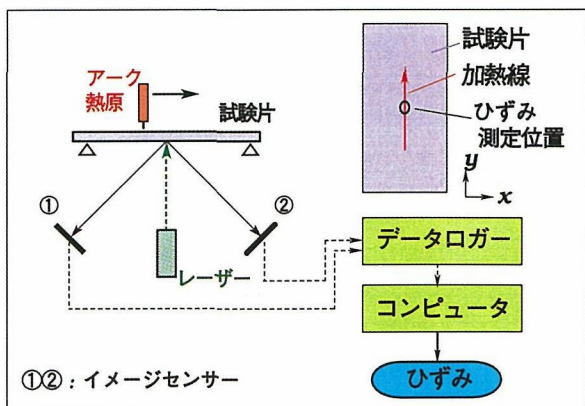


図1 ひずみ測定の模式図と試験片

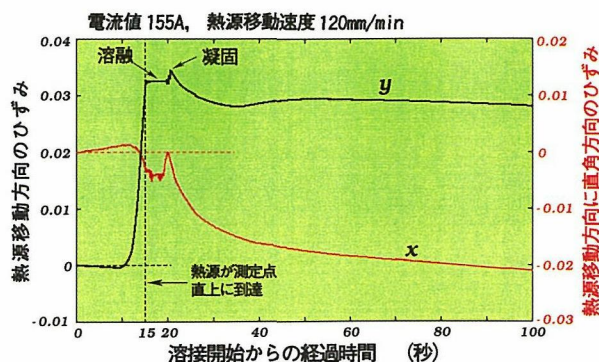


図2 裏波表面上のひずみの実測例

平成10年度（1998年度）

金属材料技術研究所研究発表会

当研究所では、毎年「研究発表会」を開催しております。平成10年度は「インテリジェントな材料の開発を目指して」について発表いたします。

日 時：1999年2月18日（木） 13:00～17:15
場 所：金属材料技術研究所（つくば市）、第1会議室
参加費：無料
受 付：当日受付（事前連絡は不要です）

研究発表会プログラム

「インテリジェントな材料の開発を目指して」

1. あいさつ..... 13:00～
所長 岡田 雅年
2. 金材技研におけるインテリジェント材料の研究開発..... 13:05～
第5研究グループ総合研究官 新谷 紀雄
3. 粒子アSEMBルによる多機能電子材料..... 13:20～
第5研究グループ第1サブグループリーダー 小林 幹彦
4. 構造材料のインテリジェント化..... 14:00～
第5研究グループ主任研究官 岸本 哲
5. 形状記憶合金薄膜..... 14:40～
第5研究グループ第2サブグループリーダー 石田 章
- 休憩..... 15:20～
6. 先進ブロンズ法による高機能複相材料の創製..... 15:40～
プロセス制御研究部長 鈴木 洋夫
7. 生体適合性向上のための表面改質技術..... 16:20～
生体融和材料研究チームリーダー 塙 隆夫
8. おわりに..... 17:00～
研究総務官 斎藤 鐵哉

稲葉大和科学技術政務次官が当研究所を視察

稲葉大和科学技術政務次官が平成10年10月21日(水)に当研究所に来訪され、「アトムプローブによる耐熱材料の解析と材料設計」及び25t圧延・鍛造シミュレーターを約1時間にわたり熱心に視察されました。

村上主任研究官(右側)より耐熱材料の解析と材料設計について説明を受ける稲葉政務次官(左側)



受賞 Congratulations!

科学技術情報振興賞功労賞 科学技術振興事業団

藤田充苗

「データフリーウェイの構築」は、わが国情報科学技術の振興に貢献するところ顕著であることを認められ、上記の賞を受けた。

電子顕微鏡部門第二位 1998年国際金属組織写真コンテスト

小川一行 菊池武丕児

「同一結晶方位を持つ500万個のナノ結晶集合体」の写真に対して、上記の賞を受けた。

表紙説明

整合析出型合金の組織形成シミュレーション。時間の経過とともに析出粒子の形状は細長くなってゆき、特定の方向へと配向してゆく。ここでは無次元時間である。

■編集後記

今回の特集は計算科学材料科学特集です。前にも一度特集を組んでいますが今回は前のは違った計算材料科学を特集しました。近年のコンピューターの発達により、データを蓄積することによって材料の変化をシミュレーションすることもできるのです。

発行所 科学技術庁金属材料技術研究所
〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1
TEL. (0298) 59-2045 FAX. (0298) 59-2049
ホームページ <http://www.nrim.go.jp>

通巻 第481号 平成10年12月発行
編集兼発行人 細川洋治
印刷所 前田印刷 株式会社