

FTMP 場の理論に基づく高 Cr フェライト系耐熱鋼の不均質回復と クリープ強度劣化過程のマルチスケールシミュレーション

研究代表者 神戸大学大学院 工学研究科機械工学専攻 准教授 長谷部 忠司

1. 緒言

高 Cr フェライト系鋼は、Fig.1 に示すような、ラスマルテンサイト組織を基本とする複雑・高度な階層組織を有する優れた高強度材料であり、火力プラントなどの高温部材へ使用されているが、数万時間を越える長時間域において急速にクリープ強度が低下することが知られている[1](Fig.2). これは組織の不均質回復によるものとされているが、ラス境界付近における炭窒化物の凝集・粗大化に端を発するマイクロ過程が如何にして系全体の強度低下に繋がるのか、その因果関係の詳細は必ずしも明らかではない。

本研究では、FTMP 場の理論[2-13]に基づき、組織内の不均質場を表す不適合度テンソルおよび転位密度テンソルを用いることで、多重スケールでの不均質場の発展を考慮したシミュレーション手法を確立し、同回復挙動の再現を試みる。

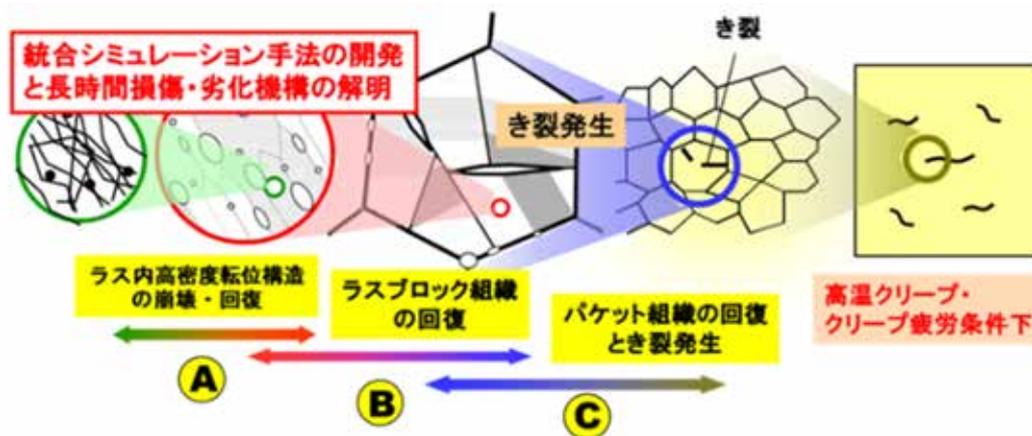


Fig.1 Hierarchically-constructed lath martensite structure for high Cr ferritic heat-resisting steels to be targeted in the present study, indicating three representative scales, i.e., Scales A, B and C.

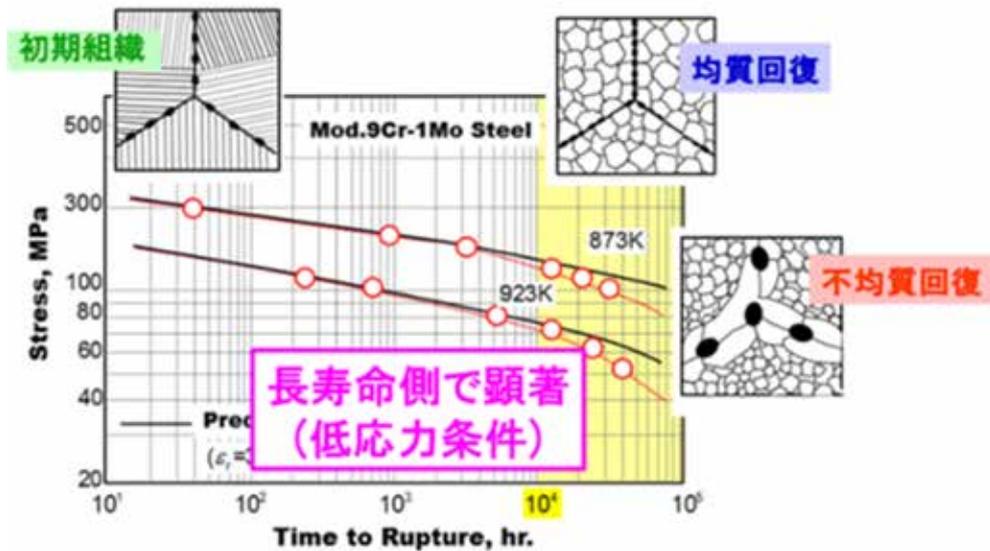


Fig.2 Accelerated creep strength in high Cr steels due to inhomogeneous recoveries of lath martensite structures in low-stress/long-term regime.

2. FTMP 場の理論について

2.1 理論概要

FTMP の基盤となる微分幾何学的場の理論としての非 Riemann 塑性論[14]では, 振率よりもむしろ曲率(より正確には, 振率の存在する空間での曲率)が重要な役割を担う.

連続体力学においては, 塑性ひずみテンソルの二回回転(double curl)で与えられる不適合度テンソルに対応する. 同量は, Volterra により分類された並進的(or トポロジカルな)欠陥である転位および回轉的(or 計量的)欠陥である回位(disclination)の両者を包含する, より上位に位置する概念である.

2.2 Flow-Evolutionary 仮説について

FTMP では, 変形中に不均質に蓄積されるひずみエネルギー場と, 局所的塑性流動に伴う不適合度場とのエネルギーのやり取りが, 各スケールでの不均質場の発展を駆動すると捉え, これを「流動発展に関する作業仮説」Flow-Evolutionary Law としている[2].同仮説は FTMP の中心概念であり, 不適合度テンソルとエネルギー・運動量テンソル(のゆらぎ成分)との間の関係(次式)で与えられる.

$$\boldsymbol{\eta} = \kappa \delta \mathbf{T} \quad \eta_{ij} = \kappa \delta T_{ij} \left(\delta T_{ij} \equiv T_{ij} - \langle T_{ij} \rangle_{scale} \right) \quad (1)$$

ここで, 一種のエネルギー輸送を担う両量(双対係数) κ が, 対応する不均質場の発展過程を定量的に表すパラメータとなる. とくに時間成分に対しては,

$$\eta_{KK} = \kappa(\delta U^e + \delta K) \quad (2)$$

となり，不適合度テンソルの第一不変量が，エネルギーゆらぎと直接対応付けられる．さらに，両量の間を関係を図示したものが双対線図である．これまで，両量の絶対値に対する系全体での総和を採用していたが，現在，エネルギー流れの，より詳細な分析に向けた同描画方法についても検討を行っており，その概要を Fig.3 に示す．

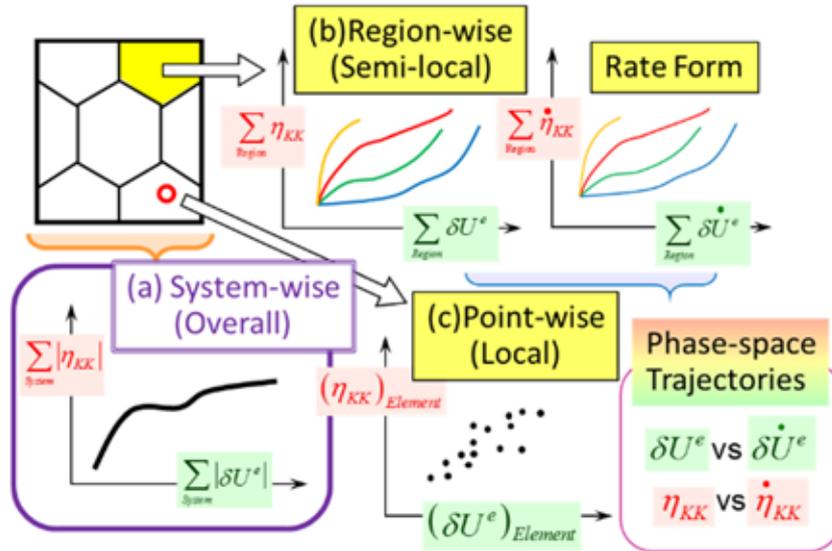


Fig.3 Schematic illustration depicting a tentative variation of “duality diagram” representations.

なお，以上述べたエネルギー輸送過程は，不適合度テンソルに基づく”マイクロ自由度”の場の理論的表現を結晶塑性構成式における硬化則に導入することで，容易に実際の計算上考慮することが可能である．

3. 解析モデルおよび結果

3.1 階層性ラス・マルテンサイトモデルの作製

本研究では，Fig.4 に示すように，高密度転位組織を有するマルテンサイト・ラスを最微視構造(Scale A)とし，同ブロック(Scale B)，同パッケージ(Scale B')そしてそれらを内包する旧オーステナイト粒の集合体である階層組織(Scale C)のモデル化を行う．そのためには，(i)強度発現機構の再現，および(ii)(i)に連動したスケール間相互作用の導入，の2点が少なくとも必須である．Fig.5 に単一ブロックモデルの作製過程を示す．ここでは，Bain 格子対応に基づく初期変位勾配分布をモデルに与えた上で，等二軸圧縮変形を加えることで，所望のバリエーションを有するラス・ブロック組織を形成させる．特筆すべきは，この過程において，らせん転位密度成分 α_{22} および α_{33} で構成されるラ

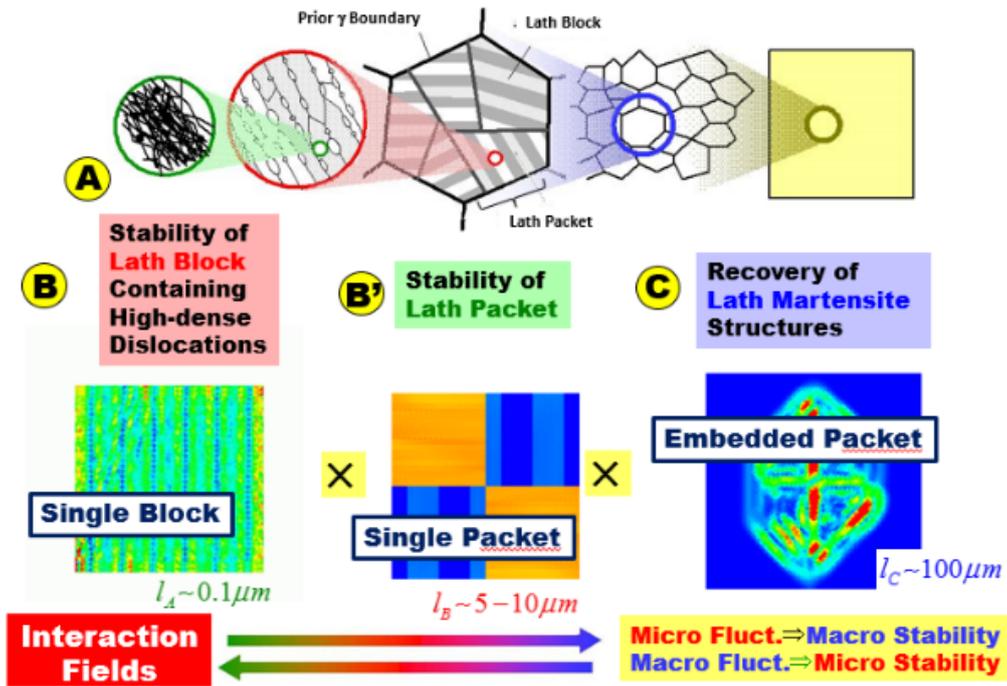


Fig.4 Three-scale hierarchical modeling scheme in present study, i.e., for (A)single block, (B)single packet and (C)embedded packet models.

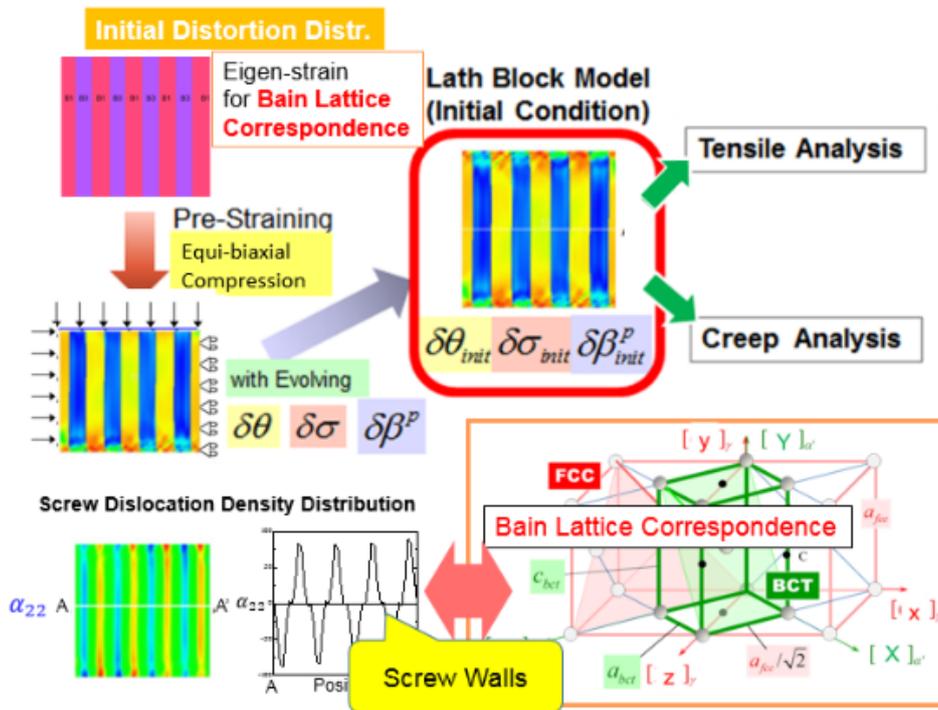


Fig.5 Fabrication process of single lath block model via preliminary equi-biaxial compression with initial distortion distribution based on Bain lattice correspondence.

ス壁が自発的に発展することである。

以上の手順で得られたブロックモデルを Scale B の基本構造とし， Fig.4 中に示す Scale A モデルを組込むことで，高密度転位組織を有するマルテンサイト・ラスブロックモデルが完成する．ここでは，相互作用場 η_{BA} の影響を考慮した $\tilde{\eta}_B = \eta_B + e_{BA}^{-1}\eta_{BA}$ を分解することで，下位スケールである Scale A の転位密度場 ρ_A および α_A を評価するとともに， α_A に伴う回復を，相互作用場における時空混合成分，

$$\eta_{i4}^{BA} = -\partial_t^B (\alpha_{jk}^A)_{sym} \quad (3)$$

を，スケール比 $e_{BA}^{-1} \equiv \dot{\gamma}_A^p / \dot{\gamma}_B^p$ を乗じた上で硬化則に導入することで考慮する．これは，刃状転位密度の Scale B における時間微分を表す．なお，本稿では，簡単のため，式 (3)の代わりに， Fig.6 中に示す，

$$\langle R \rangle = \left\langle -a\mu b \dot{\rho}_A^{(\alpha)} / \sqrt{\rho_A^{(\alpha)}} \right\rangle \quad (4)$$

を直接硬化則に加えることで同効果を表現した．

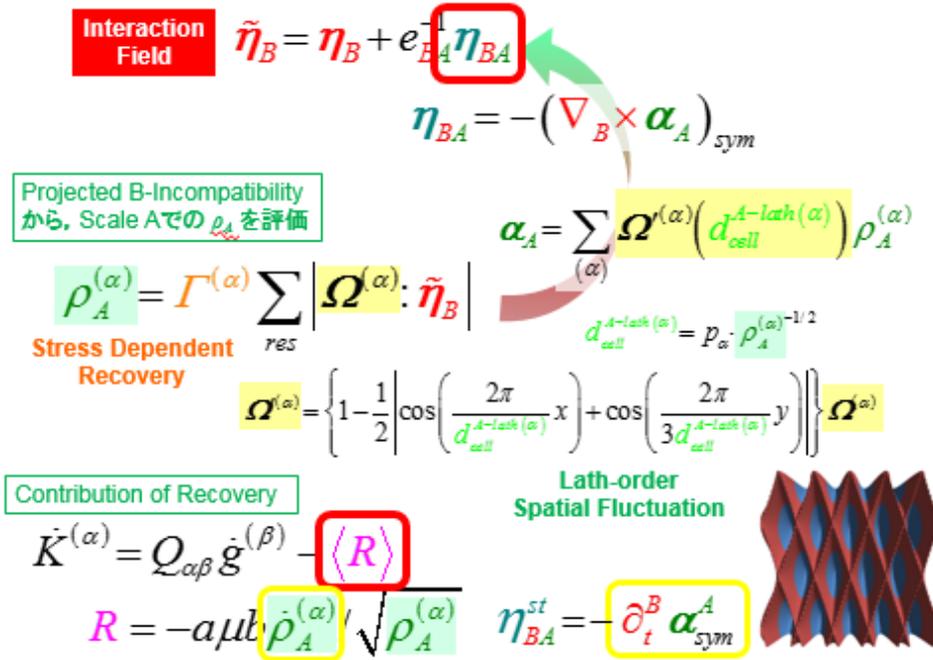


Fig.6 Two key models (η_{BA}, R) in current modeling approach that enables inhomogeneous recovery-triggered accelerated creep rupture.

3.2 階層性ラス・マルテンサイトモデルにおけるクリープ変形・破壊挙動

上述の方法で作成したモデルを単一ブロック(A)とし，これらを複数組み合わせさせた単

一パッケージ(B), さらに同モデルを単結晶内に埋め込んだ, 埋め込みパッケージ(C)とモデル構成を進めた場合のクリープ破断解析例を Fig.7 に示す. 3.1 で述べた(i)および(ii)の2点は, 上述のように(A)の段階で(η_{BA}, R)を通じて考慮されている. とくに後者(ii)により, 相互作用場を介した転位密度ゆらぎの”負のフィードバック”機構が活性化され, 同機構によって局所変形が急速に促進された結果, 爆発的な転位密度の増加を伴う加速的なクリープ破壊が生じる. 重要なのは, この”ゆらぎの増幅効果”であり, 低応力条件下においてのみ活性化され, 高応力条件では抑制される.

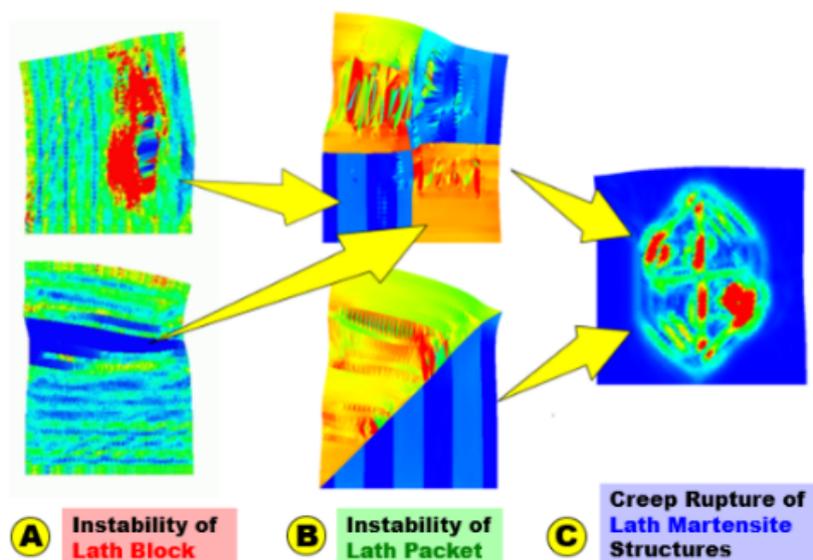


Fig.7 Hierarchical modeling-based three-scale simulations, i.e., with single blocks for Scale A, single packets for Scale B, and embedded packet for Scale C.

Fig.8 に, (C)のモデルに対するクリープ速度線図を示す. ここでは相互作用場 η_{BA} と回復モデル R の有無の影響とともに示している. 高応力条件(200MPa)では η_{BA}, R の有無に関わらずほぼ同様の傾向を示すことがわかる. 同図には, 相当ひずみ分布図を併記している. また, Fig.9 に低応力条件下(100MPa), (η_{BA}, R)=(on, on)の η_{BA} のノルムの分布変化を示している. 注目すべきは, 低応力条件(100MPa)における, クリープ破断に至る過程での複雑な挙動である. すなわち, 上でも述べたように, 破断の前駆的挙動としてクリープ速度にゆらぎが生じ, ブロック境界近傍における相互作用項の爆発的増加(”発火”現象)を経て, 加速的な最終破断に至る. なお, 同現象は, η_{BA} と R どちらを抜いても発現しておらず, 相互作用場 η_{BA} の導入と回復項(R)の導入の両者が不可欠であることがわかる. 代表的な三条件下で得られたクリープ破断時間線図を, 改良 9Cr-Mo 鋼に対する実験結果の上にプロットした結果を Fig.10 に示す. なお, この”発火”現象は, パッケージ界面等におけるクリープき裂の発生に対応していると解釈できるが, その発現機構については更なる精査が必要である.

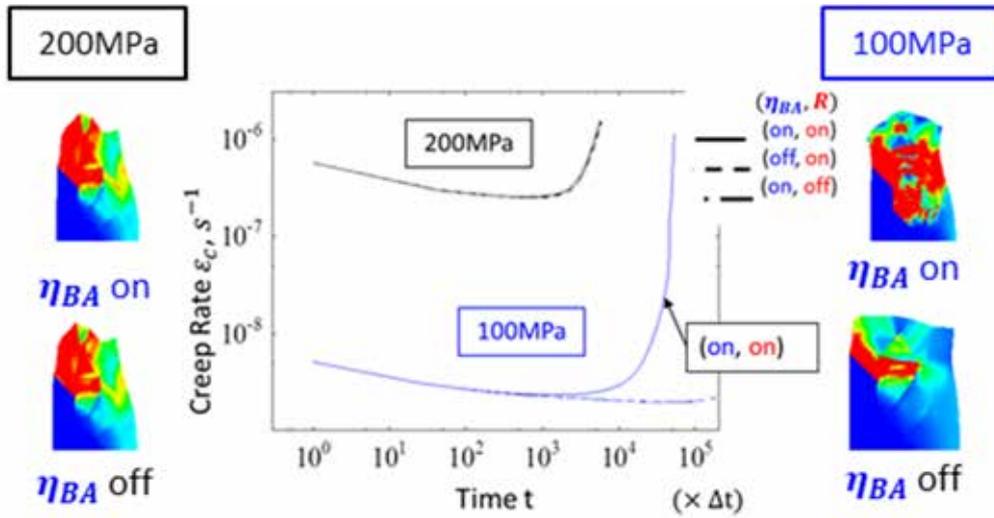


Fig.8 Comparison of creep rate versus time curves for two stress levels between analytical conditions with and without interaction of incompatibility η_{BA} and recovery rate R .

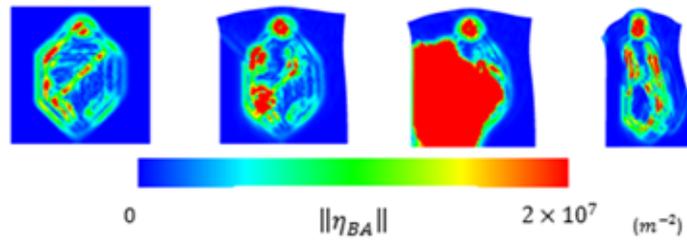


Fig.9 Contour diagrams of norm of interaction tensor in low stress condition with $(\eta_{BA}, R) = (\text{on}, \text{on})$.

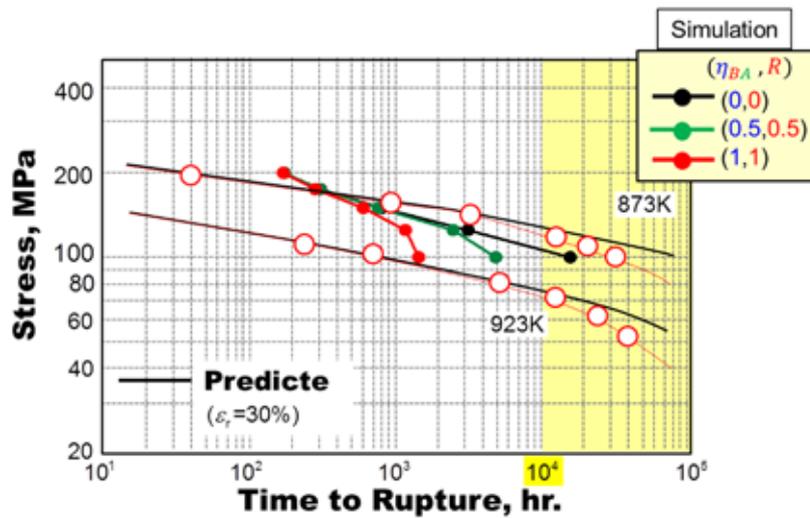


Fig.10 Simulated creep strength, comparing contributions of $(\eta_{BA}$ and R), plotted on experimentally-obtained diagram [Kushima, et al., (1999)].

3.3 分解方向の検討

上記モデルにおいて、Scale A の平均転位密度テンソル $\rho_A^{(\alpha)}$ を Scale B の不適合度 $\tilde{\eta}_B$ から評価するとき、式 (5) に示すように不適合度 $\tilde{\eta}_B$ を特定の方向に分解して求めてきた。本章では、この 5 つの分解方向の変形挙動への寄与を調べるため、いずれか 1 つを除いた場合と、1 つのみ用いた場合の 2 ケースについて 3.2 と同様のクリープ解析を行った。

$$\rho_A^{(\alpha)} = \frac{l}{b} \{ |(t^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}) : \tilde{\eta}_B| + |(s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}) : \tilde{\eta}_B| + |(m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}) : \tilde{\eta}_B| + |(m^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}) : \tilde{\eta}_B| + |(m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}) : \tilde{\eta}_B| \} \quad (5)$$

ここで、各分解方向の $m^{(\alpha)}$, $s^{(\alpha)}$ および $t^{(\alpha)}$ は、それぞれ各すべり系のすべり面法線方向、転位のすべり方向および転位線方向を表している。

Fig.11 に分解方向を 1 つ消去し残り 4 つを用いた解析のひずみ速度の時間変化のグラフを、Fig.12 に分解方向を 1 つだけ用いた解析のひずみ速度の時間変化のグラフを、それぞれ示す。Fig.11 より、1 つ消去した場合には、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解を消去したときのみクリープ速度の上昇が抑えられ、クリープ強度の低下が抑制されていることがわかる。Fig.12 より、1 つだけ用いた場合には、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解以外ではクリープ強度の低下が生じず、 η_{BA} off に近い値を示している。一方、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解では早いタイミングで加速クリープが生じており、従来の解析に近い値を示している。次に、Scale A の平均転位密度 $\rho_A^{(\alpha)}$ の時間変化のグラフを Fig.13 に示す。 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解は他の 4 つの分解方向を用いた条件より $\rho_A^{(\alpha)}$ の値が小さいにもかかわらず、早く破断していることがわかる。これらの結果から、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解が支配的な効果を有しており、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解単独で不均質回復を伴うクリープ強度の低下を表現することが可能であると考えられる。

次に、 $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ 分解が持つ意味について考える。 $m^{(\alpha)}$ はすべり面法線方向の単位ベクトルであるので、そのテンソル積である $m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ は、同方向を特徴付けるファブリックテンソルでもある。同量により不適合度テンソルを分解することは、同方向への投影と考えられるので、Fig.14 に示すように、刃状転位の上昇方向の不適合度フラックスと Scale A における転位密度場が関連付けられる。転位の上昇運動は高温クリープにおいて組織の回復を生じさせる一因であると指摘されている[15]。しかし、ラス・ブロック境界はらせん転位のネットワークによって構成されているため、刃状転位の上昇運動の回復過程への寄与については今後検討する必要がある。

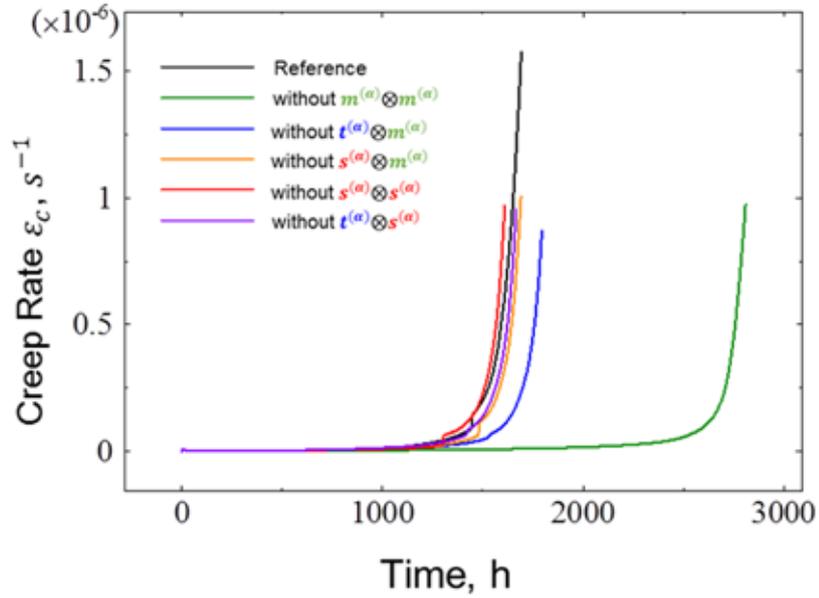


Fig.11 Comparison of creep rate vs. time curves among analytical conditions excluding one of five projection directions from Eq.(1), i.e., “only with” conditions.

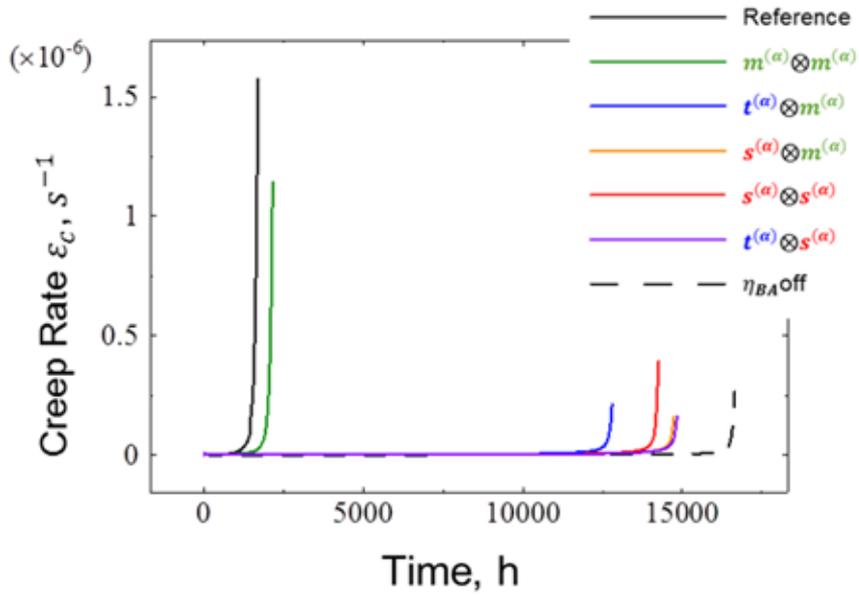


Fig.12 Comparison of creep rate vs. time curves among analytical conditions with only one projection direction in Eq.(1), i.e., “only without” conditions.

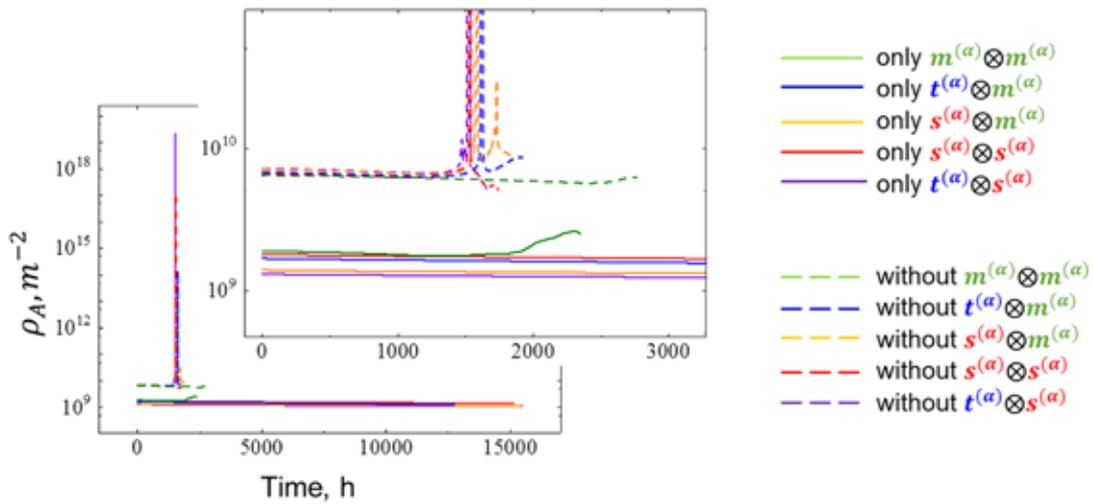


Fig.13 Variations of mean dislocation density in Scale A with time, comparing conditions used in Figs.11 and 12.

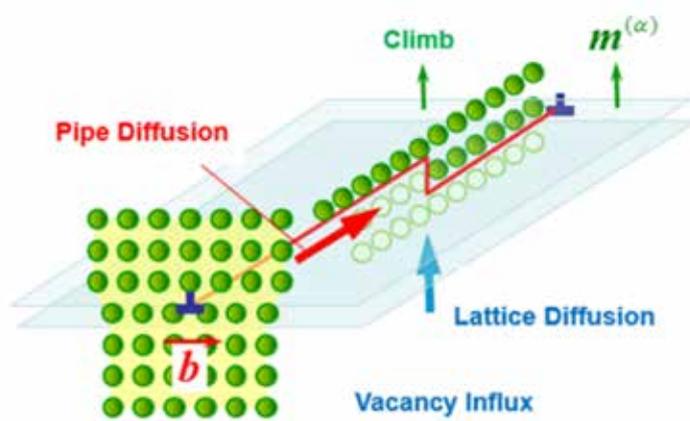


Fig.14 Schematic illustration of climb mechanism of edge dislocation in conjunction with vacancy influx.

3.4 双対線図に基づくエネルギー流れ・不適合度発展過程の可視化について

Fig.15 にパケット埋め込み型モデルのモデル全体での双対線図(Fig.3(a)に対応)を、それぞれ示す。双対線図に関しては相互作用場 η_{BA} の導入と回復項 $\langle R \rangle$ を導入していない条件の結果についても併記してある。同図より、主要 2 モデルを用いた場合には最後にそれぞれの値が大きく変化しているが、それ以外のところでは他の条件と大きな違いは見られない。

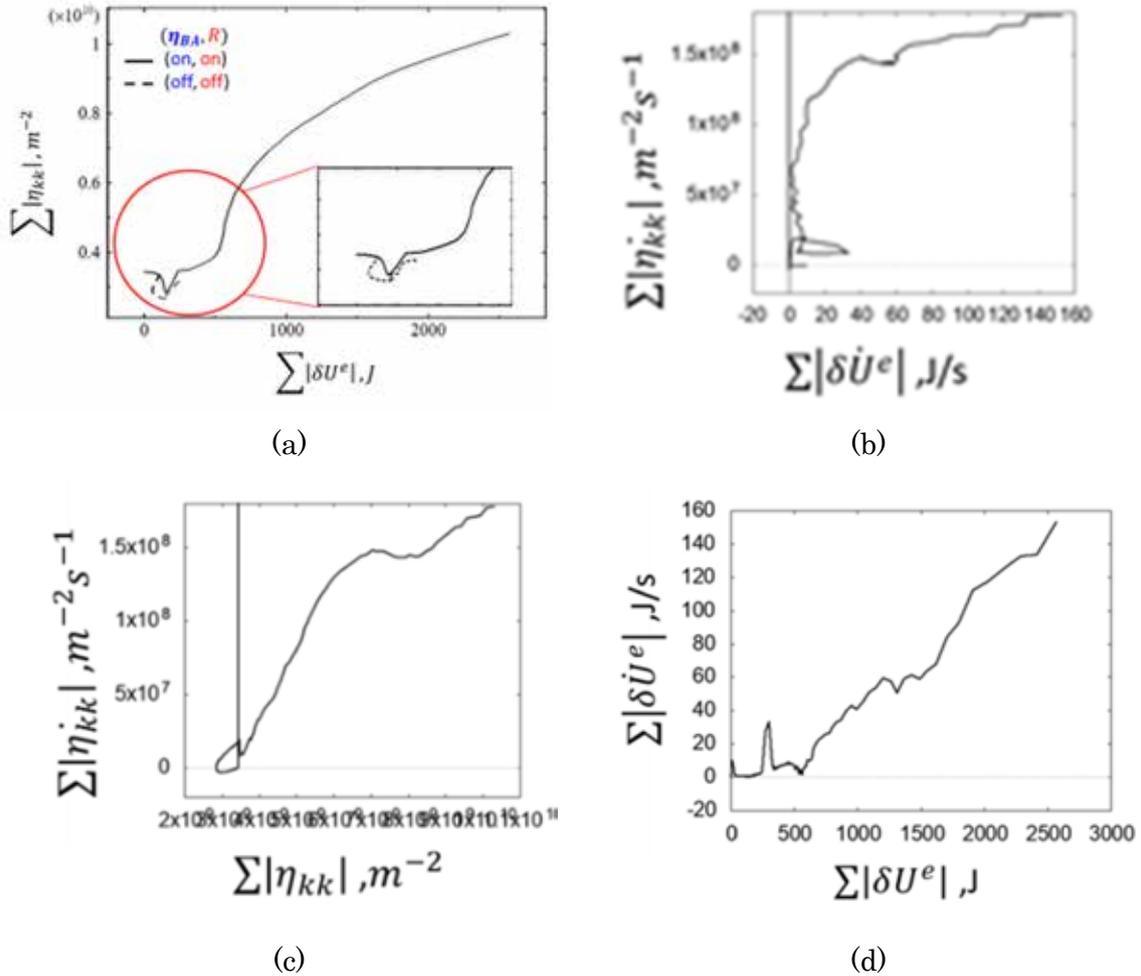


Fig.15 Duality diagrams for embedded lath packet model in creep (Fig.3(a)), yielding inhomogeneous recovery-triggered accelerated rupture.

次に、Fig.16 に各粒毎の双対線図(Fig.3(b)に対応)を示す。同図より、 δU^e の変動が大きい、双対線図とその速度系の間で第4粒や第6粒などいくつかの粒において増減の傾向について類似性がみられる。さらに、類似性の見られた粒同士では相空間トラジェクトリーにおいてグラフの傾きが似ている傾向がみられ、発展の傾向が似ていると考えられる。一方、類似性のあまりみられなかった粒は相空間トラジェクトリーにおいて他の粒とグラフの傾きが異なる傾向がみられた。しかし、特異な応答を示した粒は不均質回復を起こした中央の粒ではなく、なぜそのような挙動を示したのかはまだ不明であり、さらなる解析が必要である。

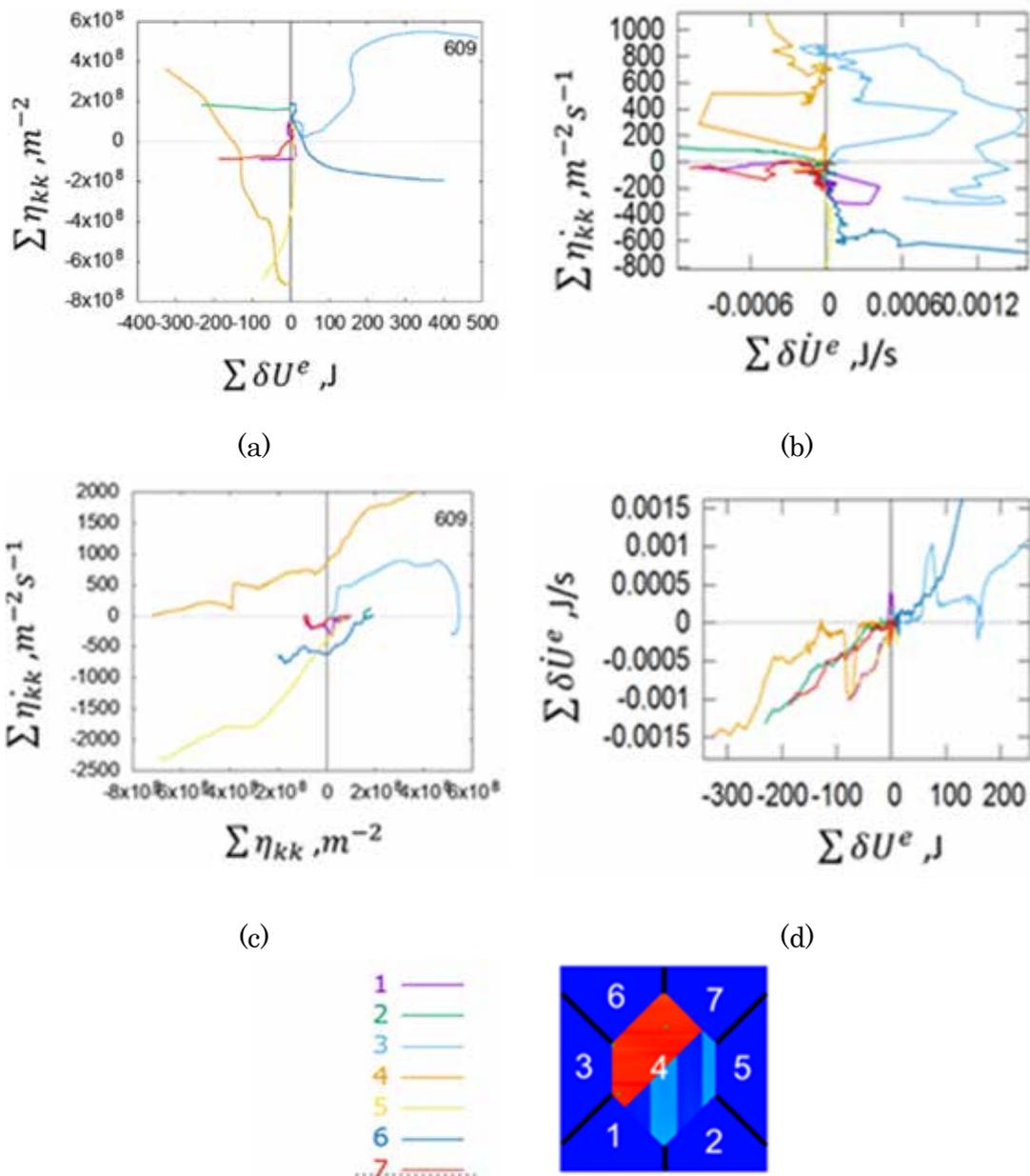


Fig.16 Region-wise duality diagrams for embedded lath packet model in creep, yielding inhomogeneous recovery-triggered accelerated rupture.

さらに、解析終了時の各点毎の双対線図(Fig.3(c)に対応)を Fig.17 に示す。なお、パケット組織領域は、モデル中央(上下 2 領域)に位置しており、不均質回復が生じるのは同下部のパケット境界近傍の粒界三重点からである。同図からパケット組織領域において双対線図における両量の分散(η_{kk} では正負両方向、 δU^e では正方向)の度合いが著しいことがわかる。

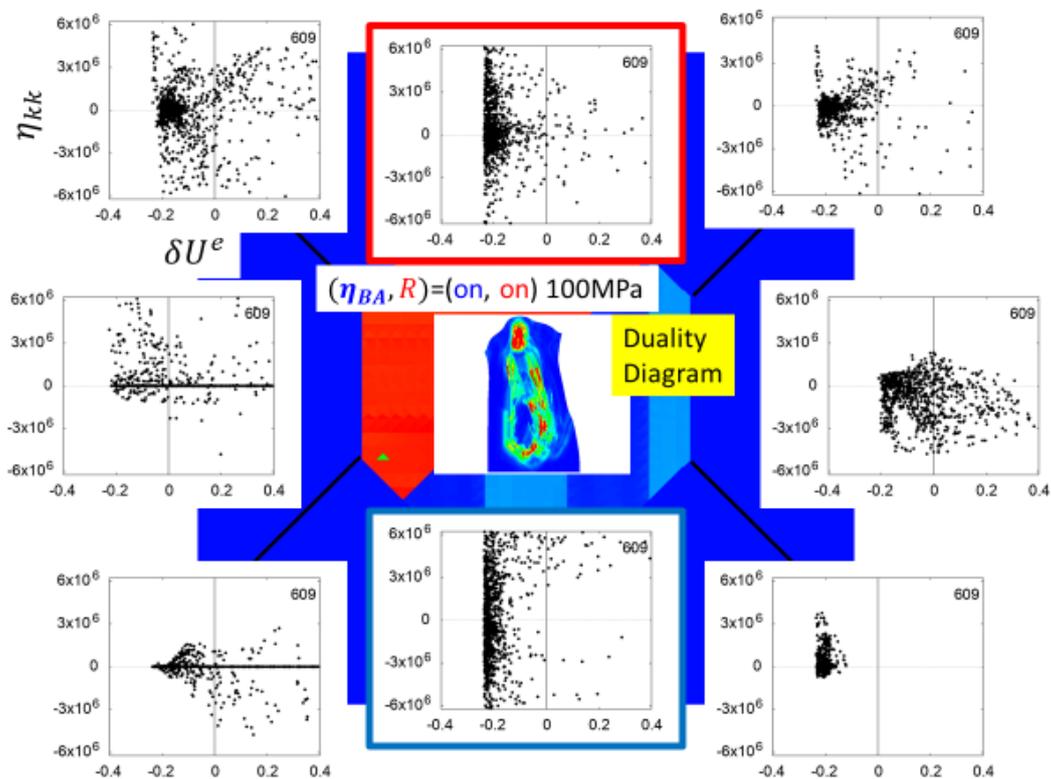


Fig.17 Point-wise duality diagrams for embedded lath packet model in creep, yielding inhomogeneous recovery-triggered accelerated rupture.

Fig.18 に、周囲の粒(Fig.17 左下)とパケット組織領域(Fig.17 真下)の各点毎の双対線図の時間変化を相互作用場 η_{BA} の分布図の変化とともに示す。同図より、周囲の粒で生じた弾性ひずみエネルギーゆらぎ δU^e が増加、減少した後にパケット組織領域において η_{kk} の上昇と相互作用項 η_{BA} の急激な値の増加が生じている。このような一連の挙動から弾性ひずみエネルギーが中央粒のラスパケット部の不均質場に配分され η_{BA} の爆発的な値の上昇を引き起こしており、蓄積された弾性ひずみエネルギーが不適合度へ解放され不均質場発展の駆動力となっていると考えられる。次に、Fig.19に Fig.18と同じ領域の η_{kk} の位相空間トラジェクトリー(Fig.3 参照)を示す。原点中心に全体が右旋回する傾向が確認できる。これは、すべての解析条件、結晶粒において共通して右旋回の傾向が確認された、安定応答を示す変形において、各部が互いに連動しながら、あたかも”足並みを揃える”が如く η_{kk} が発展する様相を示すことがわかっている。ここでは、周囲領域だけでなく不均質回復が生じる同下部も、右旋回する傾向がみられたが、不均質回復が生じる同下部ではとくに大きな分散が顕著に見られるのが特徴である。

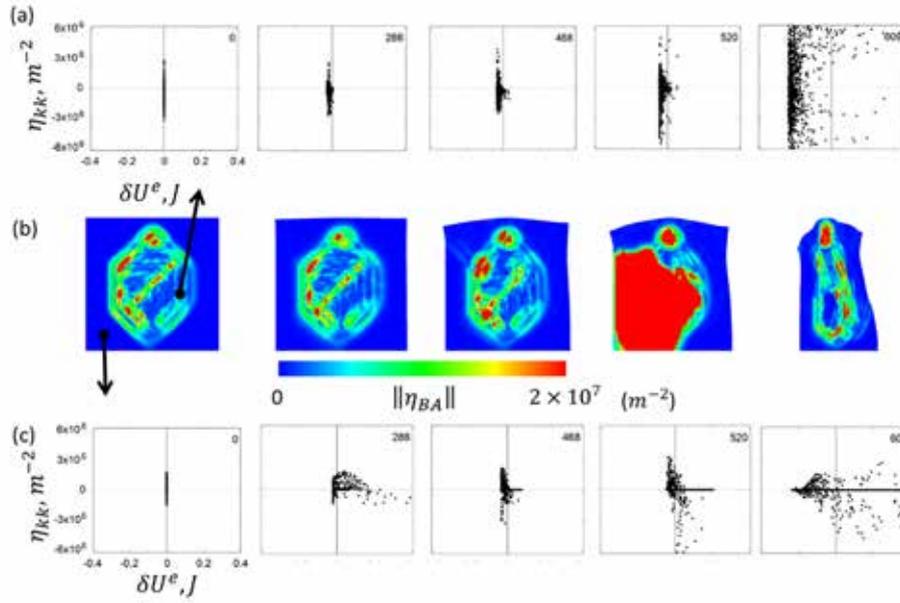


Fig.18 Variation of point-wise duality diagrams of (a) center grain and (c) surrounding grain and (b) Contour diagrams of norm of interaction tensor.

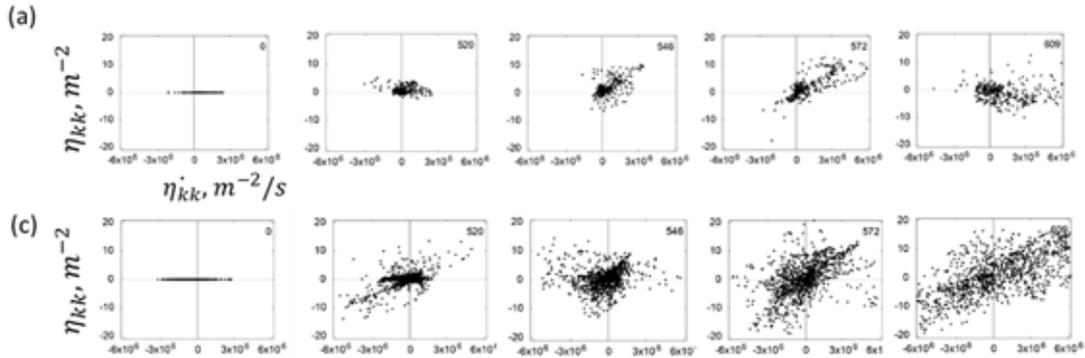


Fig.19 Region-wise presentations of point-wise phase-space trajectories for incompatibility in Fig.18.

4. 結言

本研究では、FTMP場の理論に基づく流動発展仮説の考え方と、同理論に立脚したラスマルテンサイト組織のモデル化、クリープ変形解析を行った。下部組織との相互作用を考慮したモデルを導入することにより、低応力条件下でのクリープ強度の急激な低下を表現することに成功した。さらに、従来のモデル全体での双対線図だけでなく、粒毎、各点毎の双対線図を作成し、不均質場の発展のより詳細な評価を試みた。これにより、発生した余剰弾性ひずみエネルギーが蓄積され、その後、他の粒の不適合度へ解放されて、不均質変形の駆動力となるようなエネルギーの流れを可視化できることが示唆された。

さらに相互作用を考慮したマルチスケールモデルにおいて、Scale A の平均転位密度テンソル $\rho_A^{(\alpha)}$ を Scale B の不適合度 η_B から評価する際に用いる分解方向の寄与について調べた。 $\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ 分解を用いた条件において、クリープ強度の低下がみられ、 $\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ 分解を消去した条件では不均質回復が生じなかったことから、 $\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ 分解が支配的な効果を有しており、 $\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ 分解単独で不均質回復を伴うクリープ強度の低下を表現することが可能であると考えられる。 $\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ 分解は刃状転位の上昇方向に関連した値であると考えられ、転位の上昇運動は高温クリープにおいて組織の回復を生じさせる一因であると指摘されている。しかし、刃状転位の上昇運動の回復過程への寄与については今後検討する必要がある。

謝辞

本研究は(公財)JFE21 世紀財団の 2017 年度大学研究助成を受けて実施したものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

1. H. Kushima, K. kimura and F. Abe, *Tetsu to Hagane*, 85-11 (1999), 841.
2. T. Hasebe, M. Sugiyama, H. Adachi, S. Fukutani, and M. Iida, *Mater. Trans.*, 55-5 (2014), 779.
3. T. Hasebe and M. Sugiyama, *Proc 35th Riso Int. Symp. Materials Science: New Frontiers of Nanometals*, (ed. by S. Fæster, D. Juul Jensen, N. Hansen, B. Ralph and J. Sun), Tech. Univ. Denmark (2014) 313.
4. T. Okuda, K. Imiya and T. Hasebe, *Int. J. Comput. Mater. Sci. Eng.*, 2-3 & 4 (2013), 1350021.
5. N. Kajiwara, K. Imiya and T. Hasebe, *Int. J. Comput. Mater. Sci. Eng.*, 2-3 & 4 (2013), 1350022.
6. T. Hasebe, *Int. Multiscale Mech.*, 2-1 (2009), 1.
7. T. Hasebe, *ibid.*, 2-1 (2009), 15.
8. M. Yamada, T. Hasebe, Y. Tomita and T. Onizawa, *ibid.*, 1-4 (2008), 437.
9. Y. Aoyagi, T. Hasebe, P. C. Guan and J. S. Chen, *ibid.*, 1-4 (2008), 423.
10. Y. Aoyagi and T. Hasebe, *Key Eng. Mater.*, 340-341 (2007), 217.
11. T. Hasebe, *CMES*, 11-3 (2006), 145.
12. T. Hasebe, *MRS-J*, 29-8 (2004), 3619.
13. T. Hasebe, *Mesosopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials (Proc. IUTAM Symp.)*, (eds. H. Kitagawa, Y. Shibutani), Kluwer, (2004), 381.
14. K. Kondo, *RAAG Memoirs*, 1 (1955), 458.
15. 丸山公一, 中島英治: 高温強度の材料科学,(1997)