

© 1991 ISIJ

/////////
論 文
 ///////////

オーステナイトステンレス鋼の高温変形 挙動のコンピューターシミュレーション

武内 朋之*・門馬 義雄*²・坂本 正雄*²

Computer Simulation of High-temperature Deformation Behavior of Austenitic Stainless Steel

Tomoyuki TAKEUCHI, Yoshio MONMA and Masao SAKAMOTO

Synopsis :

A computer simulation system which calculates the high-temperature tensile deformation of austenitic stainless steel has been developed on the basis of a dislocation modeling. Plastic deformation by the external force is expressed by the flow of dislocations, and the load-deformation curves are computed as the reaction of material to a tensile testing machine. The formation of internal stress by work hardening and its recovery is represented by a cell structure model in which the framework is constructed by edge dislocation dipoles. The model also accounts for the temperature dependence of the effective stress by three types of dislocation motion; free, pinning and dragging. The simulation system outputs computed curves of load-elongation and creep strain-time relation for the conventional tensile and creep tests. By selecting suitable parameters in the model, the system is designed to allow us to predict the stress-strain and creep-rupture behavior of austenitic stainless steel. The model is so flexible that we can obtain good curve fitting to the experimental data of NIRM Creep Data Sheet.

Key words : austenitic stainless steel; cell structure; computer simulation; creep-rupture; creep strain-time; dislocation modeling; high-temperature deformation; load-elongation.

1. 緒 言

理想化された単純な状況の下では、結晶の塑性変形挙動について転位モデルによるコンピューターシミュレーションが、いくつか報告されている^{1)~3)}。実用材料の塑性変形は、転位に関係する数多くの素過程が組み合わされたもので構成されているため、その変形挙動を予測するためには、それらに関与する数多くの素過程を取り入れた数学的なモデルを構築することが必要である。これを実現するためには、対象とする材料の微細組織に関する情報と、できるだけ広い条件のもとにおける変形挙動のデータが必要である。金材技研クリープデータシートとしてまとめられている高温用金属材料に関する体系的な実験データ⁴⁾⁵⁾は、このような数学的モデルを組み立てるうえで、極めて有用な資料の一つである。この報告は、単純化した転位運動モデルをベースに高温用金属材料の塑性変形挙動をシミュレートすることのできるコン

ピューター・モデルの構築の一例である。対象としては、実用材料の中で比較的単純な内部組織を持つオーステナイトステンレス鋼⁶⁾に着目する。そして、実験値として得られているクリープ破断寿命と転位運動に関係する各種のパラメーターとの関係を考察する。

2. 考え方と基本式の要約

材料の塑性変形を転位のふるまいとしてとらえるためには、一例として Fig. 1 に示すような考え方が必要である。試験機による力学的な拘束が試験片に加えられると、材料内に転位の流れが現れて、材料の塑性変形が起こる。このときの試験片の試験機に対する反作用を記録したものが、荷重-変位曲線やクリープ曲線などと称される変形曲線である。転位の流れは、動いている転位の密度 n と速度 v との積、すなわち引張りひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ で表される。

$$\dot{\epsilon} = bnv \cdots \cdots \cdots (1)$$

平成 2 年 4 月本会講演大会にて発表 平成 2 年 6 月 1 日受付 (Received June 1, 1990)

* 金属材料技術研究所 理博 (National Research Institute for Metals)

*² 金属材料技術研究所 (National Research Institute for Metals, 2-3-12 Nakameguro Meguro-ku, Tokyo 153)

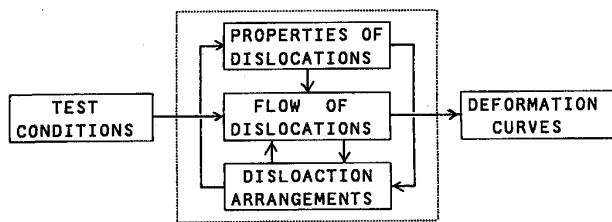


Fig. 1. Fundamental concept of computer simulation for deformation behavior of metals and alloys.

ここで、 b はバーガス・ベクトルの大きさである。試験機に働く力を試験片の断面積で割った値が変形応力 σ であるが、それは転位を動かすのに必要な有効応力 σ_e と転位配列によって作り出される内部応力 σ_i との和として表される。

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_i \quad \dots\dots\dots (2)$$

材料の変形モデルを構成する基本式は、転位の移動に関係するものと、加工硬化及びその回復の実体である転位配列に関係するものとの二つに分類できる。

2.1 転位の移動

固溶体結晶で溶質原子の拡散による移動が起こらない低温においては、転位速度の温度及び有効応力に対する依存性は、次の式で表現できると仮定した³⁾。

$$v_F = C_F \exp \frac{-V_F(\tau_0 - \tau)}{kT} \quad \dots\dots\dots (3)$$

ここで、 C_F は音速に近い定数、 τ_0 は 0 K で転位を移動させるのに必要なせん断応力、 τ は有効せん断応力、 V_F は活性化体積、 T は温度、 k はボルツマン定数である。以後、(3) で表される v_F を転位の自由速度と呼ぶ。

通常の固溶体結晶では、刃状転位の余分の原子面の端の近くに位置している溶質原子が、その隣接するマトリックス原子と入れ替わって、安定な位置に落ち込むと、その刃状転位は動けなくなる⁷⁾。刃状転位が 1 原子間隔動くのに要する時間が、この入れ替わりの活性化時間より長くなると、その転位はピン止めされて動けなくなる。すなわち、転位の自由速度 v_F は、次の限界ピン止め速度 v_P よりも大きくなければならない。

$$v_P = C_P \exp \left(-\frac{E_P}{kT} \right) \quad \dots\dots\dots (4)$$

ここで、 C_P は速度定数、 E_P はピン止めのための原子交換の活性化エネルギーである。

ピン止めされた転位は、転位芯に取り込まれた溶質原子の転位の進行方向への拡散速度と同じ速度で移動することができる。すなわち、転位が溶質原子を引きずりながら移動するときの速度 v_D ⁷⁾ は

$$v_D = C_D \exp \frac{-(E_D - V_D \sigma_e)}{kT} \quad \dots\dots\dots (5)$$

ここで、 C_D は速度定数、 σ_e は転位に働く有効引張応力、 E_D は溶質原子の転位芯の中で移動するときの活性化エネルギー、 V_D はその活性化体積である。

(3) 及び (5) 式の転位速度は有効応力がゼロに近いとき、正の方向に移動する確率と逆方向に移動する確率との差になるから、有効応力を含む指数関数 $\exp$ を $\sinh$ の双曲線関数に書き直した。このようにすると、全温度範囲で有効な転位速度を与えることができる。

(1) 式のひずみ速度は転位速度のほか、動いている転位の密度に比例する。この変化が変形応力に反映されるのは、上降伏点あるいはひずみ時効に伴う荷重の変動がある場合であるが、オーステナイトステンレス鋼の場合には、これらの現象は見られない。また、次節で説明する加工硬化モデルにおいては、高温クリープ変形域における(2)式の有効応力は加工硬化による内部応力に比較して十分に小さく、ゼロと見なすことができる。以上の理由により、塑性変形が起こっている局所領域の中で動いている転位の密度は、一定の値 10^{-10} m^{-2} と仮定した。高温クリープ域においては、この値を 1000 倍変えても、変形応力には影響しないことが確かめられている。

2.2 転位配列と加工硬化

Fig. 2 は加工硬化した鉄の [110] 結晶を引張変形したときに形成されるセル構造をモデル化したものであり、これを基にして鉄単結晶の各種の変形曲線の数値計算が行われている²⁾。この計算では有効応力をゼロとし、塑性ひずみはそれぞれの層状領域の中で独立して瞬間的に活動する不連続すべりによって進行すると仮定した。このすべりの発生頻度が試験片全体のひずみ速度に対応する。個々のセル壁の中の転位密度は、その横ですべ

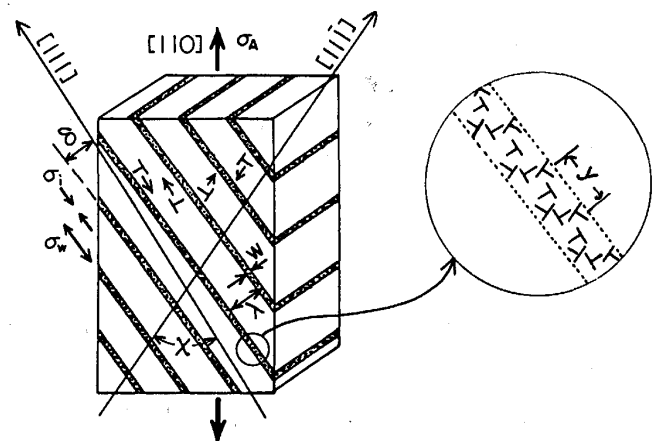


Fig. 2. A model of cell structure in deformed iron single crystal, and the dislocation arrangement in the cell walls²⁾.

りが働いたときに増加するため(後述), 場所によって異なる。(2)式の内部応力は, それらの刃状転位密度の平均値 $\bar{\rho}$ に比例し, 次の式によって表される。

$$\sigma = h\bar{\rho} \dots \dots \dots (6)$$

ここでは h を加工硬化係数と呼ぶことにする。鉄の [110] 単結晶のときには, h は Fig. 2 で示された, いくつかのパラメーターを含む一つの関数として表現でき, その値を 490 MPa とすると室温から 900°C の範囲で, 荷重-伸び曲線とクリープ曲線をシミュレートすることができた²⁾。 h の値を一定にするということは, Fig. 2 に示された転位配列のスケールが変形応力に対して比例的に小さくなるということを意味している。オーステナイトステンレス鋼においては, 後で示すように温度により変形機構が変化するため, h を与える転位配列は複雑な変化をするが, Fig. 2 のモデルを基本とする数値計算に必要なものは, h の幾何学的な内容ではなく, その値だけである。

(6)式は変形の初期に転位密度がひずみに比例して増加し, 直線的に加工硬化することを意味している。Fig. 2 に示した転位配列は刃状転位の絡み合ったもので, その力学的な安定性を支えているものは, 刃状転位の双極子である。間隔の小さな刃状転位双極子は外からの空孔の供給がなくとも, お互いの間の強い引力と転位芯を通る自己拡散によって, 一連の刃状転位ループの列に変化することが知られている⁸⁾。そして, 間隔が d である双極子が刃状転位ループに変化する時間 δt は次式で表される。

$$\delta t = 10^{-14} \xi^4 \frac{(U - U_s \xi)}{kT} \dots \dots \dots (7)$$

ここで, $\xi = b/d$, d は刃状転位双極子の間隔, U は刃状転位の芯を移動する空孔の形成エネルギーと移動エネルギーの和である。 $U_s \xi$ の項は転位双極子の結合エネルギーである。このモデルでは加工硬化の回復速度を(7)式で与えられる刃状転位の消滅と, それに伴う転位密度の減少として定式化している。したがって, 刃状転位の配列の力学的な安定性が増せば, 熱的に不安定になることが予想される。

塑性変形の素過程としては Fig. 2 のセル壁の間の層状領域の中で活動する有限の塑性ひずみを持つ不連続すべりを考える。結晶内の微小体積要素の中には 10 層のセル壁を配置した。単位すべりが活動すると, 最も弱い(刃状転位密度の小さい)セル壁の転位密度を増加させ, そのセル壁を強化する。(2)式の内部応力は 10 枚のセル壁内の刃状転位密度の和に比例するから, すべりが活動した直後に内部応力は極大になる。次のすべりが働く

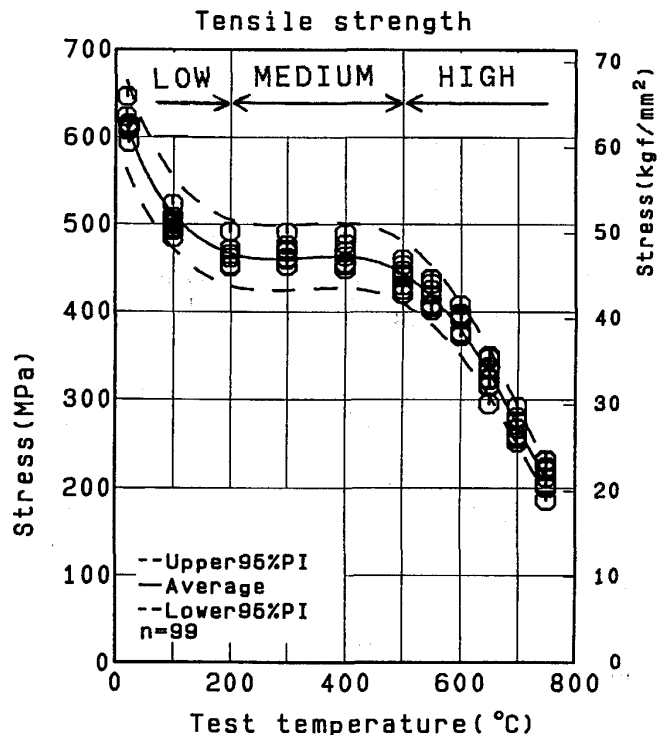


Fig. 3. Temperature dependence of ultimate tensile strength for SUS304H steel⁶⁾. The strain rate is 6×10^{-5} m/s.

までの時間の間に, 間隔の小さい刃状転位双極子は(7)式によって消滅する。以上がこのモデルによる加工硬化の回復過程である。すべりの活動する時間間隔は, 試験条件によって決められる。この回復モデルが原子の拡散過程を念頭においているにもかかわらず, 室温付近でも適用できることは, 常識に反するようであるが, 次のことに着目すれば理解できる。ひずみが 10% になると, 確率的に 1 原子面の間隔を持つ転位双極子がかなり作られる。そこで(7)式で d を b に等しいとおくと, 純鉄の中の転位双極子の消滅時間は室温でも秒のオーダーになる²⁾。

(6)式の h の値は, 対象とする材料の変形応力を参照して決定した。オーステナイトステンレス鋼の引張強さの温度依存性は, Fig. 3 のように, 低温, 中温及び高温の 3 領域に分けられる。それぞれの領域における変形挙動は Cu-10 at% Al 合金単結晶の実験結果⁷⁾ によると, つぎのようになっている。

まず, 低温では, 転位は溶質原子の動きとは無関係に自由に運動できる。中温では, 溶質原子のピンニングの起こる速度よりも転位は早く動かなければならない。そして, 高温では転位は溶質原子を引きずりながら動く。転位の運動モードのこのような違いは転位配列にも影響を及ぼす。このため, 加工硬化係数 h の大きさは, 変

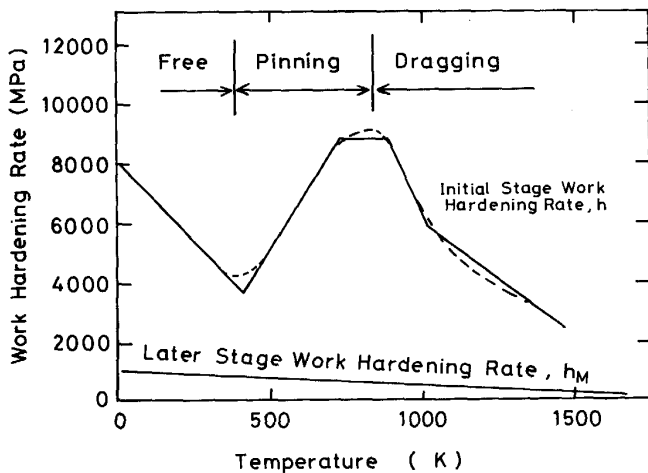


Fig. 4. Temperature dependence of work hardening coefficients for a constant crosshead speed test, for the initial stage (h) and the later stage (h_M) work hardening. Dashed curve shows h expected from the behavior in Fig. 3, and solid curve is an approximation adopted in the model.

形温度及び変形速度により、例えば Fig. 4 の点線のように変化する。このような変化は簡単な関数で表現することができないので、今回の変形モデルでは Fig. 4 の実線のように 5 本の折れ線で近似した。それぞれの線分の位置を与える定数には、ひずみ速度によって変化する項も含まれており、単純な式では表せない。

大きな延性を持つ材料の変形の後期には、真ひずみ ϵ に対して直線的な加工硬化が認められるが、これは荷重-変位曲線の一樣伸びの大きさを決める要素である。この加工硬化係数 h_M による寄与は Fig. 4 に示すように、一般に小さく、試験温度の上昇、あるいはひずみ速度の低下により単調に減少する。このことは、変形の進行により形成されるセル構造が微細化し、さらに隣接するセルの間の結晶方位のずれが増大することに対応している⁹⁾。

転位配列と関係する内部応力は、上述の二つの現象を足し合わせたものとして、

$$\sigma_i = h\epsilon + h_M\epsilon \quad \dots\dots\dots (8)$$

の式で計算した。

2.3 試験条件

試験機の剛性は試験片の塑性変形が起こらないときの、試験機の荷重-変位曲線として表される。通常のネジ式引張試験機のパネ定数は非線型であるから、このモデルでは試験機の剛性としての力 F と変位 x との関係

$$F = K_1x + K_2x^2 \quad \dots\dots\dots (9)$$

として 2 個の弾性定数 K_1 及び K_2 を用いた。

試験片としては直径 5 mm、平行部長さ 50 mm の丸棒を仮定した。変形は長さを伸ばす方向だけを考慮した。定速引張試験及び定時荷重クリープ試験による試験片のくびれの開始は、それぞれ最大荷重点を過ぎたとき及び伸び速度が最低になる点を過ぎたときとした。その後は、試験片の長さが 1 単位伸びるごとに、平行部の長さが一定の比率で短くなると仮定した。実験データによる荷重-変位曲線と一致するように、この比率の値を適当に選ぶと、荷重-変位曲線の最大荷重点以降の曲線を近似できる。くびれの中心部の引張応力の最大値はブリッジマンの式¹⁰⁾で計算した。

3. 変形曲線の計算方法

変形曲線を計算する手順を Fig. 5 に示す。一定の有限の変位を試験片に繰り返し与えて計算のサイクルを構成した。この大きさは試験片の標点距離の 0.2% とした。JIS の高温引張り (G0567) のような定速引張試験では、変位制御モード (D) であるが、変形の初期に外力が小さくて転位による変形が所定の変位量に達しないことがある。このときには試験機系が弾性変形することにより試験片に働く力を増加させる。転位の流れが十分にあれば、与えられた変位に相当する塑性変形が試験片に生じ、材料は加工硬化する。続いて、次の変位が与えられるまでの時間 Δt の間に起こる回復量を計算する。そして、転位の流れを発生させるのに必要な有効応力 (σ_e) の大きさを決める。これは、そのときのひずみ速度と動いている転位密度 (10^{10} m^{-2}) から決まる転位速度を、対応する転位速度式 (3) または (5) 式、に代入したときの応力として与えられる。このようにして得られた有効応力と加工硬化による内部応力 (σ_h)、そしてくびれが進行している場合にはその 3 軸応力 (σ_3) も計算し、それらの和として変形応力が求められる。この変形応力が破断応力 (σ_f) よりも小さいときには、現在の変形領域の長さとその断面積を求めて、次の計算サイクルへ進む。これを試験片の真応力が破断応力に達するまで繰り返す。破断応力はくびれが始まるときの真応力の 2 倍と仮定した。クリープ試験のときには、始めに試験片に加わる力がクリープ荷重になるまでは 1 mm/s の速度の変位制御で変形させる。その後は、試験片を支える力がクリープ荷重よりも小さくなったときに 0.2% に相当する塑性ひずみを与えて加工硬化させる。更に回復により試験片の強さがクリープ荷重に等しくなるまでの時間 dt を計算する。クリープ速度は ($\Delta x/dt$) として記録される。この計算は変形応力が破断応力に一致するまで繰り返される。

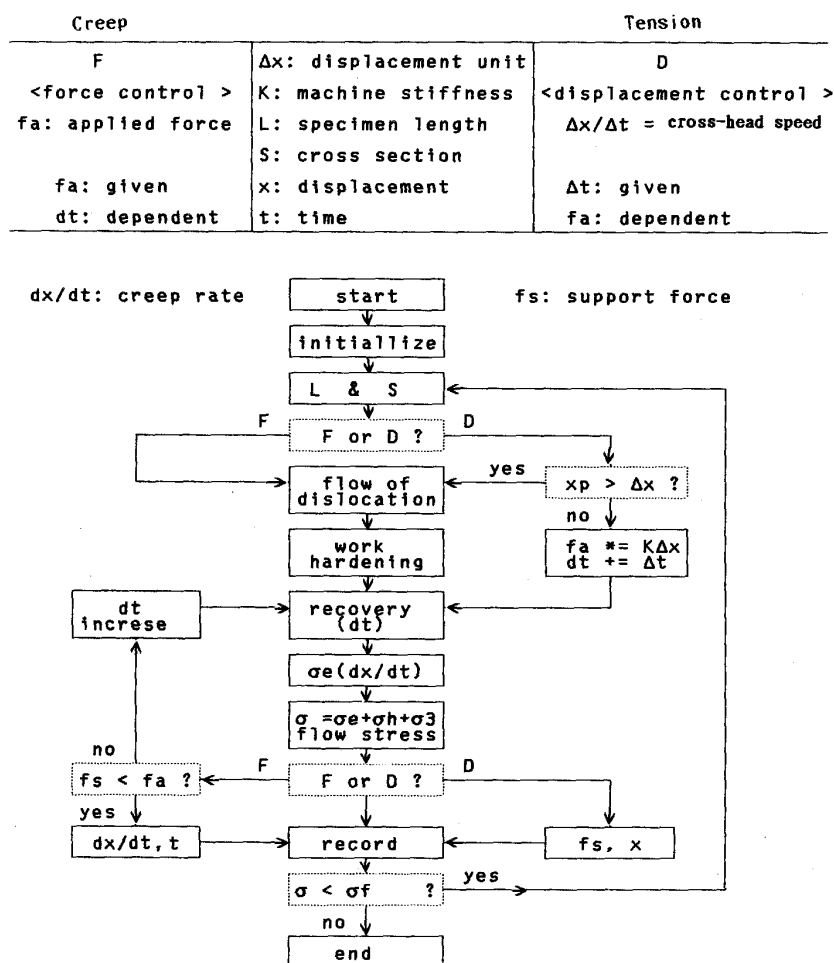


Fig. 5. Flow chart of computer simulation procedure for deformation curves of the model material.

4. 計算結果と考察

金材技研クリープデータシートの SUS304H 鋼⁶⁾ の高温強度特性データによるふるまいをモデル材料として、変形曲線を計算した。このモデル材料を一定の速度で引張変形させたときの荷重-変位曲線から得た、最大荷重の温度による変化を Fig. 6 に示す。この図には Fig. 3 の引張強さの平均値の曲線も重ねて示してある。Fig. 7 は片対数目盛りによる 600°C のクリープ曲線群である。応力は荷重を試験片の初期断面積で割った公称応力の単位で示してある。各曲線の時間軸を破断時間で割って正規化したものが Fig. 8 である。負荷直後の伸びが最大のもので、すなわち、最大応力のクリープ曲線が階段状となっているのは、転位のピンニングに伴う不安定現象のためではないかと想像されるが、その詳細については検討していない。他のクリープ曲線群は通常の実験曲線と似た形をしている。このようなクリープ曲線群を 300°C から 1200°C の温度範囲で計算した。荷重と破断時間

の関係を等温曲線としてまとめると Fig. 9 が得られる。この図には、実験データとの比較のため、304H ステンレス鋼のクリープデータシートの平均値（全部で 9 ヒートについて時間・温度パラメーター法による）が点線で記入してある。

Table 1 は以上の計算に用いたモデル材料を特徴づける材料定数及び試験パラメーターなどの一覧である。弾性定数、音速、密度、融点及び格子定数などは通常の材料定数表からとったものである。転位の生成・消滅特性に関する定数はさまざまな状況を総合的に判断して決めたが、これらの数値は本来、結晶構造や合金組成から決定されるべきであり、大きく変化させる余地はほとんどない。これらの中で拡散の活性化エネルギーに関する定数は材料の融点に比例するものであり、他の合金に対するモデルを考える場合の参考となろう。

加工硬化係数 h は Fig. 4 で説明したとおり、転位配列に対応する材料の微細組織を反映したもので、温度及びひずみ速度により複雑に変化する量である。ピンニン

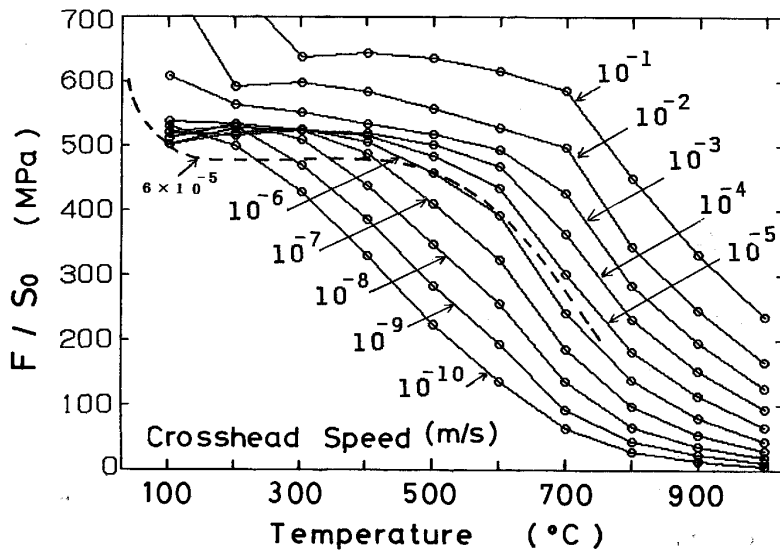


Fig. 6. Tensile strength versus temperature for the deformation curves of the model material. Dashed curves are corresponding experimental data of SUS304H steel deformed at 6×10^{-5} m/s⁶⁾.

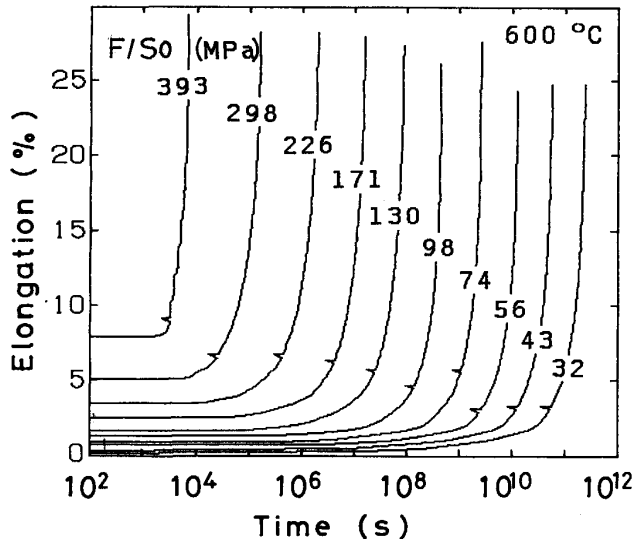


Fig. 7. Computed creep curves at 600°C for the model material. The cusps indicate the onset of tertiary creep.

グ及び引きずりに関係する定数は、現段階では試行錯誤的に決めている。将来は実験による応力-ひずみ曲線との対比から、より合理的にこれらの定数を決定できるようになれば、この材料モデルの適用性が増すと考えられる。

最後の試験条件パラメーターは引張りあるいはクリープ試験に対応するもので、試験機や試験条件から直接的に得られる数値である。現在のモデルは外力を一定（クリープ）あるいは定クロスヘッド速度（引張り）で与えた場合のひずみ応答を仮定しているが、定ひずみ速度としたときのひずみ応答（高温引張り）や定ひずみに対する応力低下（応力リラクセーション）への拡張も可能で

Table 1. Material constants, microstructural parameters and test parameters for the model material.

Material constants			
Shear modulus	G	8×10^{10}	Pa
Sound velocity (transverse)	C_T	5	km/s
Density	d	8	kg/m ³
Melting point	T_M	1750	K
Lattice spacing	b	0.25	nm
Properties of dislocation (Movility or annihilation)			
Free motion of dislocation			
Yield shear stress at 0K	τ_0	200	MPa
Activation volume	V_F	3×10^{28}	m ⁻³
Dragging motion of dislocation			
Activation energy	E_D	3×10^{-19}	J/atom
Activation volume	V_D	5×10^{-28}	m ³
Pinning by solute atoms			
Activation energy	E_P	9×10^{-20}	J/atom
Annihilation of edge dislocation dipole			
Activation energy	U	4×10^{-19}	J/atom
Attraction energy	U_S	2×10^{-19}	J/atom
Dislocation arrangement (Microstructure and work hardening)			
Work hardening rate at 0K	h_0	8000	MPa
Pinning effect for work hardening	h_{P0}	1000	MPa
	h_{P1}	7	[O]
	h_{P2}	0.12	[O]
Dragging effect for work hardening	h_{D1}	36000	MPa
	h_{D2}	30	[O]
	h_{D3}	15000	MPa
	h_{D4}	9	[O]
Later stage for work hardening	h_{M0}	1000	MPa
	h_{MR}	0.02	[O]
Test parameters			
Specimen length	L	0.05	m
Specimen diameter	D	0.005	m
Spring constant of testing machine	K_1	2×10^6	N/m
	K_2	2×10^9	N/m ²
Crosshead speed, external force, and temperature			

ある。

オーステナイトステンレス鋼の固溶化熱処理材料のミクロ組織をオーステナイト単相と見なして、転位配列に関するパラメーターを Table 1 のように与えることで実験データと整合させた。このモデルでは酸化などの

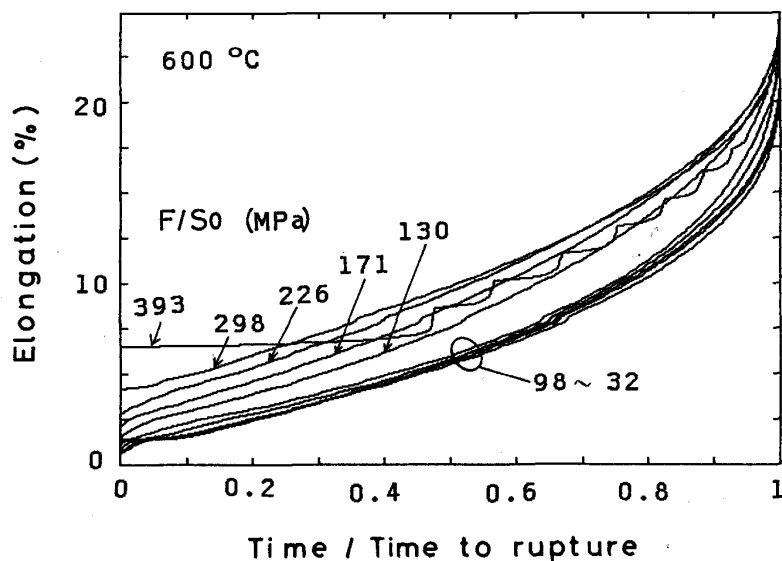


Fig. 8. Creep curves of the model material in normalized time scale.

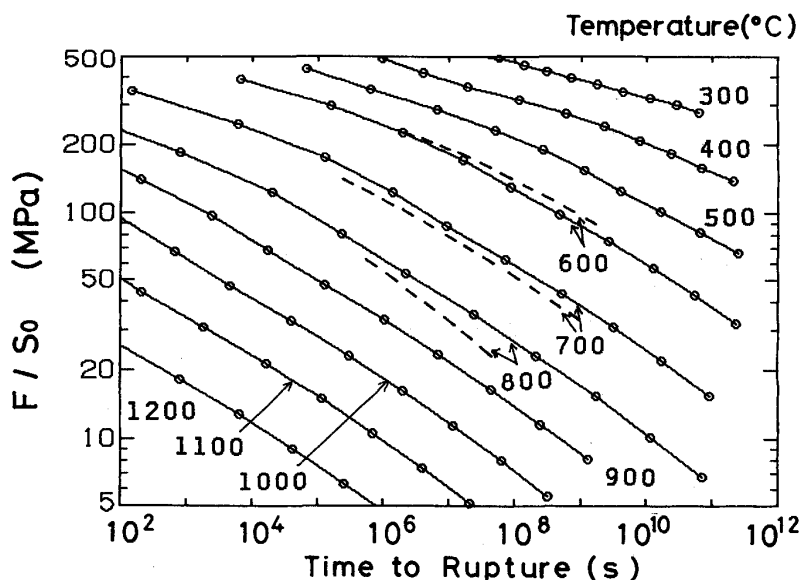


Fig. 9. Stress versus time to rupture for the model material. Dashed curves are corresponding experimental data of SUS304H steel⁶⁾.

環境効果や著しい σ 相脆化¹¹⁾などの特別な組織変化については考慮していないが、温度・応力に関して実験データが全くない。あるいは入手が不可能な領域の変形及びクリープ破断挙動の予測に有用であると思われる。

このモデルを使って、他の材料に適用していくためには、それぞれの材料の微細組織の特徴に応じた機能を、このモデルに付加することが必要である。例えば、冷間加工材に対しては Fig. 5 のフローチャートの最初のところで、降伏応力の実験データを参照しながら、材料に適度の塑性変形を与えてから計算を進めるなどの工夫が必要であろう。また、SUS316 鋼¹²⁾のようにクリープ中に時効硬化、あるいは時効軟化が現れる場合は、加工硬化パラメーターの値を時間的に変化させることで対処できよう。粒界脆化が現れる材料に対しては、破断応力

が時間と共に低下していくとすれば、破断時間と破断伸びは共に小さくなる。

5. 結 言

高温で使われる金属材料の変形挙動のコンピュータシミュレーションを行うためのプログラムを開発し、以下の結果を得た。

(1) 転位の性質と転位配列に関するパラメーターを用いて、実際の材料試験で得られる変形曲線を模擬できるシステムを開発した。

(2) SUS304 鋼の変形挙動をモデル化した材料について、各種の定数を定め、そのクリープ曲線及び荷重-変位曲線を数値計算で求めた。

(3) このモデルにより計算された引張強さ及びクリー

ブ破断時間は金材技研クリープデータシートの実験データと総合的に一致させることができた。

(4) このモデルは、長時間で組織変化による脆化や劣化などが現れる場合を除き、実験データが得られていない温度・応力領域でのクリープ破断寿命の予測などに有用である。

文 献

- 1) W. G. JOHNSTON: J. Appl. Phys., **33** (1962), p. 2716
- 2) T. TAKEUCHI: J. Phys. Soc. Jpn., **32** (1972), p. 677
- 3) T. TAKEUCHI: J. Phys. Soc. Jpn., **35** (1973), p. 1149
- 4) 横井 信ほか: 金属材料技術研究所研究報告集, **4** (1983), p. 50
- 5) 田中千秋ほか: 金属材料技術研究所研究報告集, **9** (1988), p. 39
- 6) NRIN Creep Data Sheet No. 4B (1986), SUS304HTB
- 7) T. TAKEUCHI: J. Phys. Soc. Jpn., **42** (1977), p. 580
- 8) G. W. GROVES and A. KELLY: J. Appl. Phys., **33** (1962), p. 456
- 9) H. LANGFORD and M. COHEN: Trans. Am. Soc. Met., **62** (1969), p. 623
- 10) R. HILL: Mathematical Theory of Plasticity (1950), p. 272 [Oxford Univ. Press]
- 11) 田中秀雄, 村田正治, 貝瀬正次, 新谷紀雄: 鉄と鋼, **74** (1988), p. 2009
- 12) 中沢崇徳, 安保秀雄, 小松 肇, 谷野 満: 鉄と鋼, **75** (1989), p. 2234