

## 材料開発とシミュレーション

### シミュレーション技術によるニッケル基合金の組織予測

火力発電システム用の耐熱合金は、安全性の面から長時間の信頼性が重要です。従来、合金開発は、主として熟練技術者の経験や勘を基に判断する、いわゆる錬金術的な手法で行われてきました。

東芝は、次世代高効率火力発電システムとして期待されている700℃級の先進超々臨界圧（A-USC：Advanced Ultra Super Critical）蒸気タービンのロータ用ニッケル（Ni）基合金の開発に、マイクロ組織シミュレーション技術の適用を検討しています。シミュレーション技術を材料開発に取り入れ、火力発電システムの大型構造用耐熱合金開発のリードタイム短縮、及びコスト競争力の向上を目指しています。

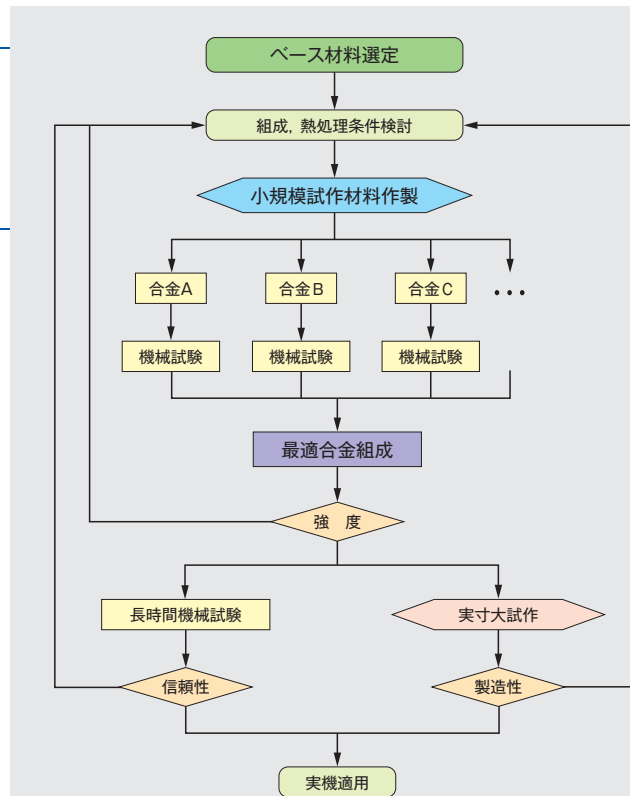


図1. 耐熱合金の開発フローチャート— 要求性能に近いベース材料を選定し、そこから組成や熱処理条件を変化させた小規模試作材料の加速試験による材料強度の評価で合金組成を最適化します。その後、長時間の機械試験による材料の信頼性を、更に実寸大試作による大型材料の製造性を確認します。

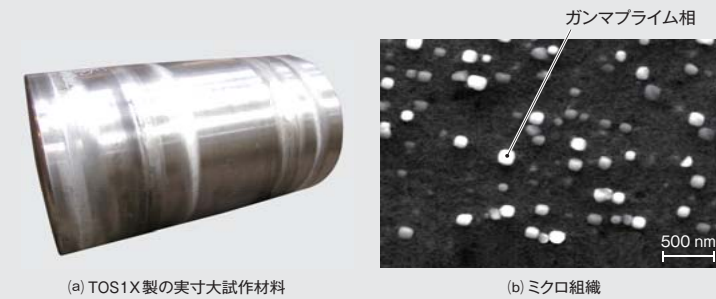


図2. Ni基合金材料— TOS1Xは、運転温度700℃での10万時間クリープ破断強度が100 MPaを超える耐熱合金です。高温強度を上げるために、合金組成や熱処理条件を制御し、マイクロ組織中のガンマプライム相を微細に分散析出させています。

表1. Ni-Cr-Al合金のガンマプライム粗大化現象

方法	経過時間		
	1 h	10 h	100 h
実験			
シミュレーション			

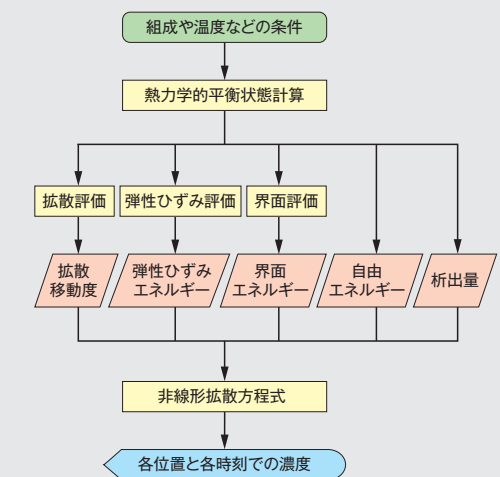


図3. フェーズフィールド法によるシミュレーションの解析手順— 組成と温度から平衡状態を計算し、析出相とその組成を解析します。各相の自由エネルギー及び拡散移動度を評価し、非線形拡散方程式を解析的に解くことで濃度が予測できます。

### 耐熱合金開発の課題

構造物用の耐熱合金は、基本的に多相かつ多結晶体です。その機械的特性は、結晶粒内の合金元素や格子欠陥及び、それに伴う転位の内部構造に依存するため、マイクロ組織をいかに制御し予測するかが材料開発には重要です。火力発電システム用の耐熱合金では、安全性の面から長時間の材料信頼性が重要です。例えば、蒸気タービンのロータ材料には、10万時間クリープ破断強度が設計基準の一つになっています。

図1に示すフローチャートのように、耐熱合金は要求性能に近いベース材料から、組成や熱処理条件を変化させた小規模試作材料を作製し、その機械特性を加速試験で評価し、合金組成を最適化する必要があります。更に開発リー

ドタイム短縮のために、長時間の機械特性試験前の合金組成や熱処理条件の絞込みが重要です。

### 材料特性とマイクロ組織

火力発電システムでは、高温及び高圧の極限環境下で10万時間（約11年）以上の材料信頼性が要求されます。

東芝が、A-USC蒸気タービンのロータ用に開発している、質量が7t、外形が850（直径）×1,500（長さ）mmのNi基合金TOS1X製の実寸大試作材料を図2(a)に示します。TOS1Xは、運転温度700℃で10万時間クリープ破断強度が100 MPaを超える高強度の耐熱合金です。このように高温強度を向上させるため、合金組成や熱処理条件を制御し、図2(b)のマイクロ組織に見られるように、ガンマプライム相を微細に

分散析出させています。

しかし高温で長時間使用すると、元素の拡散移動により合金特性が劣化することがあります。劣化現象の原因として、ガンマプライム相の粗大化による強度低下や、靱性（じんせい）や強度を急激に低下させる脆（もろ）い金属間化合物が長時間経過後に析出すること、などが挙げられます。このため耐熱合金の開発では、マイクロ組織の経年変化を予測し制御することが重要です。

### マイクロ組織予測技術

合金組成からマイクロ組織を予測する手法には、脆（ぜい）化相の析出を電子空孔濃度と関連付け、経験的に評価するPHACOMP（Phase Computation）法や、熱力学データベースから平衡状態を解析するCALPHAD（Calculation

Phase Diagram）法があります。これらは有力な解析手法であり、広く使用されていますが、マイクロ組織中の析出物の形状や経年変化を評価できません。

一方、析出物形状が解析できる手法の一つにフェーズフィールド法があります。この方法は、マクロスケールを不得意とする分子動力学法では困難な結晶粒程度のセミマイクロなスケールの解析が可能で、凝固組織形成や、固相変態現象、析出現象などの解析例が報告されています<sup>(1)</sup>。

当社では、同手法を材料開発や経年変化の予測技術へ展開するための第一段階として、Ni基合金のマイクロ組織予測技術の研究を進めています。ここでは、A-USCロータ材TOS1Xを模擬したNi基合金（Ni-25at%Cr（クロム）-8at%Al（アルミニウム））を対象に、ガン

マプライム相の粗大化現象を解析した結果について述べます。

シミュレーションの解析手順を図3に示します。各種エネルギー及び拡散移動度を評価し、非線形拡散方程式で解析することで、表1のようなマイクロ組織を予測できます。初期状態では球状で微細分散していたガンマプライム相が、時間が進むにつれ粗大化し板状へと変化するようすが良く再現できています。またガンマプライム相の平均のアスペクト比や真円度なども、推定誤差±30%以内で実験結果を再現しています。

### 今後の展望

ここで述べたフェーズフィールド法による組織予測は、Ni-Cr-Alの三元合金を対象とした研究段階のものです。

TOS1Xをはじめとする多くのNi基合金は10元素程度を含み、更にガンマプライム相以外の複数の相を含む多相合金です。

今後、この手法を多元系合金へ拡張して、実用耐熱合金の開発に使用可能なシミュレーション技術として発展させ、付加価値の高い材料開発に貢献していきます。

### 文献

(1) ナノシミュレーション技術ハンドブック委員会編、ナノシミュレーション技術ハンドブック、東京、共立出版、2006、484p.

藤田 敏之

電力システム社  
電力・社会システム技術開発センター  
金属材料開発部主務