

科学技術庁

金属材料技術研究所

材料情報相互利用システム／
クリープ、疲労データ評価法／
表面化学反応ダイナミクス

材料情報相互利用システムの構築進む

—— 3機関の新参入でデータフリーウェイが拡大 ——

当研究所は平成2年度から、ネットワークを介して材料情報を相互利用できるシステム（名称データフリーウェイ）の構築を日本原子力研究所（原研）および動力炉・核燃料開発事業団（動燃）との共同で進めてきた。このプロジェクトは各研究機関がそれぞれの得意分野について高度な材料データベースを構築し、それらを統合・共有して材料研究者や技術者が必要な情報を直接自由に得られるようなシステムの確立を目指したものである。

本システムでは、各種原子炉での照射環境下においても高性能を発揮・維持できるような原子力用の新素材開発に資するデータや知見の収録に特に力を入れている。当研究所は主として新素材の物性やイオン照射特性に関する基礎データ、原研と動燃は原子炉や加速器での照射特性に関する実験データ等の収集を行い、3機関合わせてデータの総数は5000件を上回っている。材料科学に関する多岐の問題の解決には巨大な材料データベースの支援が今後不可欠となることは必至であり、その中において本システムのように材料分野の複数機関を包括した情報相互利用システムの構築の試みは国内初である。

原子炉内のような過酷な環境下での使用に耐え得る材料

の開発には、各機関が所有する専門性の高いデータを単独または関連づけて有効に活用することが必要である。このため膨大なデータの収録、管理方法、統合したデータの検索方法等の開発を行い、利用者にとって必要情報の入手や材料特性の総合的把握などが容易に行えるシステムの構築を図ってきた。これにより材料設計等が従来に比べて格段に容易になるものと期待できる。例えば、当研究所が開発した核反応予測コードと他機関のデータとを組み合わせることにより、有害核反応生成物の発生が低い核融合炉材料を設計する手法等の確立が図れる。

本年度からは新たに通産省計量研究所（計量研）、運輸省船舶研究所（船舶研）、日本科学情報センター（JICST）がデータフリーウェイに参加することになり、これら機関が所有する熱物性と遮蔽材に関するデータや運用中のファクトデータベースも利用可能となって、データフリーウェイの情報量が飛躍的に増加するとともに、省庁の枠を越えた材料情報システムへ拡大することとなった。

データフリーウェイの構築は、科学技術庁が計画中のSTAネットや日本アカデミック・ネットワーク幹線となる省際ネット実現に先導的役割を果たすことと期待される。

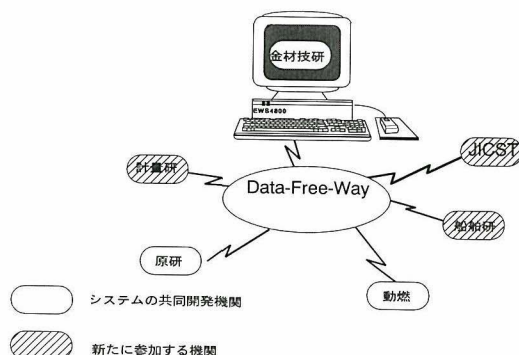


図 データフリーウェイの参加機関

クリープおよび疲労データ評価法の標準化

—— 材料特性データ解析用のソフトウェアを開発 ——

近年、先進諸国では種々の材料の性質をコンピュータ内にデータベース化し、ネットワークなどにより同じ研究グループのメンバーが利用する方向にあり、その利用技術の研究開発が進められている。VAMAS（新材料の試験・評価に関する国際共同研究）では、国内外の研究機関が構築している材料データベースの相互利用を促進するため、(1)データフォーマットの標準化、および、(2)データ解析用に種々ある解析モデルの中から適宜なモデルの選定と標準化、等を目指して検討を重ねてきた。

当研究所が実施したクリープおよび疲労に関する国際ラウンドロビンテスト（金材技研ニュース、1990年 No.7）の結果を受けて、クリープおよび疲労特性データをコンピュータで解析する場合の、解析モデルの選択や解析結果のグラフ出力について標準化の検討が行われている。その取りまとめ役は日本鉄鋼協会が務め、一方、当研究所は解析法の標準化の核心となる解析プログラムおよび解析結果をグラフ表示するためのソフトウェアを開発した。このソフトウェアは(1)クリープおよび疲労データをコンピュータ内に格納、(2)データ解析のための標準モデル式の選定、そして(3)解析結果のグラフ出力をパーソナルコンピュータで行うことができる。また、選定した標準モデルによる強度・寿命試験データの解析結果と他のモデルによる解析結果を比較する機能も備えている。

本システムによって、種々の鋼材のクリープ破断データ（試験温度、応力、破断時間）、高サイクル疲労データ（応力振幅、繰返し数）および低サイクル疲労データ（全ひずみ振幅、塑性ひずみ振幅、繰返し数）の解析が可能である。なお、本システムには、金材技研のクリープおよび疲労データシートから引用したサンプルデータがファイル化されている。また、データのファイル化には本システム用の形式のほか、汎用のデータ形式も使うことが

できて、利用者が手持ちのクリープ破断または疲労データを解析する場合に、例えばクリープ破断データならば、試験温度、試験応力、および破断時間の順に並べてファイル化すればよい。

本システムでは、クリープ破断データの解析に TTP（時間・温度パラメータ）法を採用しており、その代表的な Larson-Miller法、Manson-Haford法などが使用できる。TTP法では、まず、試験応力の対数値と、破断時間および試験温度から計算されるパラメータ値との関数関係を、採用したモデル式に基づいて統計的に解析して、データに最もよく合うようにモデル式の材料定数を求める。これによって最適なモデル式、および、それを表す主破断曲線と呼ばれる曲線を得る。つぎに、このモデル式から、図1のように、対数応力と破断時間の関係を表した等温クリープ破断曲線を描き、これらの曲線から実機あるいは他の試験条件下での長時間側の強度が外挿できる。

一方、疲労については、高サイクル疲労データの解析に応力振幅、繰返し数の両対数直線、折れ線（重み付きプロビット法）、漸近曲線などを用い、また、低サイクル疲労では全ひずみ振幅と繰返し数の両対数直線、漸近曲線などを用いている。上記と同様に、これらの場合も統計的解析を行って、各直線または曲線を表すモデル式の最適な材料定数を求め、疲労寿命を予測する。

図1は各種モデル式による18Cr-10Ni鋼管のクリープ破断データの解析結果を示した例であり、図2はVAMASの国際共同研究で行われた炭素鋼S45Cの高サイクル疲労データについての各国の解析結果を比較した例である。本システムの利用者はこれらの結果の表示画面を参照しながら最適な近似曲線を選択することができる。なお、本ソフトウェアは今年度末には一般に提供される予定である。

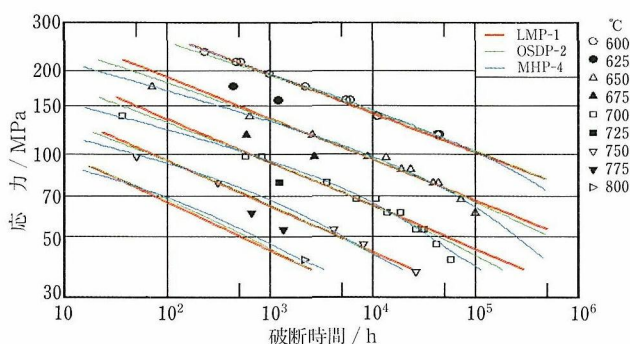


図1 18Cr-10Ni鋼管のクリープ破断データに対する、各種モデル式による解析結果

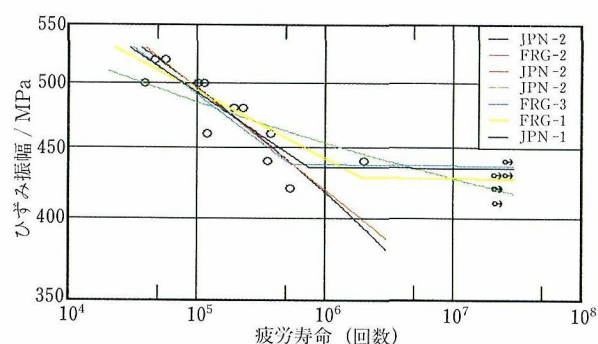


図2 炭素鋼S45Cの高サイクル疲労データに対する、国内外研究機関による解析結果の比較

表面化学反応のダイナミクス

— SiO分子を多光子イオン化で検出 —

半導体シリコン基板の酸化皮膜形成や金属表面の腐食等の、数多くの現象に見るように気体と固体表面の化学反応は実用上並びに学問上の重要な分野である。表面反応を解明するには原子分子レベルでのダイナミクス（動力学）の研究が必要であり、その研究方法に、表面を直接観察する方法と、反応する気相分子の反応前後の状態を測定し、それから表面と分子の相互作用について研究する方法とがある。本研究では後者の方法として、分子線やイオン等を固体表面に照射し、それによる動的な表面反応や表面構造変化を分光学的手法によって調べている。このほど表面反応によって生成する気体分子をレーザーMPI法（多光子イオン化法）で検出する装置を作製し、シリコン（Si）基板の表面酸化の研究を行った。その結果、表面酸化反応で生成するSiO分子について初めて、多光子吸収によりイオン化し検出することができた。以下にそれを紹介する。

超高真空装置内で約1100Kに加熱したシリコン基板に酸素（O₂）分子線を照射し、生成する気相分子を質量分析器を用いて測定した。図1に装置の模式図を示す。多光子イオン化はNd:YAGレーザーの4倍波（波長266nm）の光を用いて行った。YAGレーザーは1パルス当り出力7mJ、パルス幅8ns、パルス間隔10Hzである。測定では500パルスの積算を行った。分子線照射中の酸素圧力は10⁻⁶~10⁻⁴Paの範囲で変えて実験を重ねた。なお、質量分析器の種類は飛行時間型のうちのリフレクトロン型と呼ばれる最も感度の優れたものである。飛行管の距離は120cm、シリコン表面からイオン化位置までの距離は約5cmで、質量分析器を表面に対して垂直に配置した。

超高真空中（1×10⁻⁸Pa）でシリコンを約1100Kに加熱すると質量数28, 29, 30のSi⁺イオンのシグナルが観察された。これは基板から蒸発したシリコン原子の同位体

(²⁸Si⁺, ²⁹Si, ³⁰Si⁺)によるものである。シグナル強度は²⁸Si⁺:²⁹Si⁺:³⁰Si⁺=100:5:3で天然存在比とよく対応する。室温の基板ではこれらのシグナルは観察されない。Si原子のイオン化ポテンシャルは8.15eVであり、レーザー光のエネルギーは4.66eVであるから、イオン化は2光子過程で起こっている。

室温の基板に酸素分子線を照射すると基板で散乱した酸素イオンのシグナル(³²O₂⁺)が観測された。酸素分子線を照射しながらシリコン基板を約1100Kに加熱するとその直後はO₂⁺のシグナルが消失し、Si⁺のシグナルが現れる。これは照射された酸素分子がシリコン表面で酸化反応を起こし、ほとんど散乱されないためである。昇温後さらに数十秒経過するとO₂⁺のシグナルが再度現れて、時間とともにシグナル強度が増加する。またSi⁺のシグナルも時間とともに増加し、さらに質量数44, 45, 46のSiO⁺シグナルが観測された。SiO分子はシリコン表面での酸化反応(O₂+2Si→2SiO)で生成したものである。図2にSiOのポテンシャルを示す。生成したSiO分子の基底状態(X¹Σ⁺)からイオン化までのポテンシャルは11.4eVであるから、3光子過程が起きたものと考えられる。酸素分子線の流量を一定に保つと、SiO⁺のイオンシグナルの強度は昇温後30分ではほぼ一定になる。流量を変えて実験を行うと、シグナル強度は流量の増加にともなって増大するが、その関係は非線形である。これは酸化反応が酸素の吸着過程に関連してシリコン表面の被覆率に依存するためと考えられる。またSiO分子生成にともなうSi⁺シグナルの増加は、SiO分子の光分解により生成したSi原子のイオン化によるためと解釈される。

今後はパルス分子線および色素レーザーを用いた共鳴多光子イオン化法によってSiO分子の内部エネルギー状態を測定し、反応のダイナミクスの研究をさらに進める。

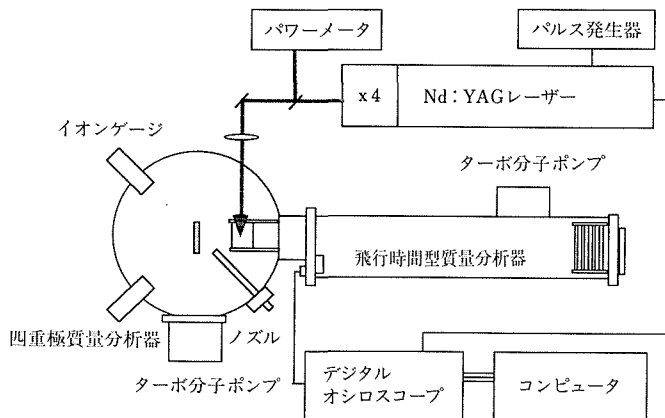


図1 実験装置の模式図

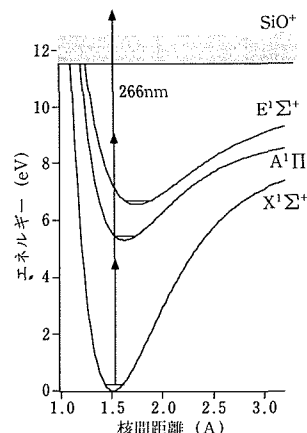


図2 SiO原子間ポテンシャル

平成5年度金属材料技術研究所研究発表会の御案内

当金属材料技術研究所では、所員の研究活動をより広く御理解していただき、その成果を御活用願うために、毎年研究発表会を開催しております。今年度は、金属材料技術に関連する基礎的現象解明への意欲的な取り組みおよび最新の研究成果を紹介致します。皆様方の御来聴をいただきたく、御案内申し上げます。

(聴講自由、プログラムと講演要旨は前号に掲載)

日時：平成5年11月11日(木) 13:15~17:00

場所：金属材料技術研究所 大会議室 東京都目黒区中目黒2-3-12

<問い合わせ先：企画課普及係，TEL 03(3719)2271(代)>

12月の研究発表（国内分）

学・協会名	開催期間	発表題目	発表者(所属)
第3回SAMPE先端材料技術国際会議(千葉・日本コンベンションセンター)	12.7~12.10	1. High Cycle Fatigue Properties of Beta Titanium Alloys.	宗木 政一(力学)他
		2. Properties of P/M Processed Titanium Alloy/Particulates Composites.	萩原 益夫(力学)他
		3. Cyclic Fatigue in Silicon Nitride Ceramics: Effects of Environment, Microstructure and Fracture Toughness.	崔 乾(力学)他
		4. Thermal Shock Behaviour of Metal Ceramics Mixtures for Ultrahigh Temperature Use.	藤塚 正和(第2)他

江田科学技術庁長官，乾政務次官，筑波支所を視察

江田科学技術庁長官は平成5年8月18日，乾政務次官は同年9月3日，当研究所筑波支所に来所され，最先端の研究成果を中心に，新しい研究本館の建設状況など所内を熱心に視察された。



前田総合研究官(右側)より超電導材料の説明を受ける江田科学技術庁長官(左側)



新居所長(右端)より建設状況の説明を受ける乾政務次官(右から2番目)

発行所 科学技術庁金属材料技術研究所
 (本所) 〒153 東京都目黒区中目黒2-3-12
 TEL (03) 3719-2271, FAX (03) 3792-3337
 (筑波支所) 〒305 茨城県つくば市千現1-2-1
 TEL (0298) 53-1000(ダイヤルイン), FAX (0298) 53-1005

通巻 第419号 平成5年11月発行
 編集兼発行人 石井利和
 問合せ先 管理部企画課普及係
 印刷所 株式会社三興印刷
 東京都新宿区西早稲田2-1-18