

小さな加工歪みで) 超強加工組織を得る原理が明らかになれば、応用面での可能性の拡大がさらに期待できる。

組織・材質予測技術のさらなる発展は、新しい合金開発において必要不可欠である。計算材料科学の最近の進歩は、計算速度の飛躍的な高速化で可能となった大規模計算に裏打ちされており、組織・材質予測の精密化に大きく寄与している。状態図計算を例にとると、B、Sなどの微量元素の影響やステンレス鋼、工具鋼などの高合金の計算に対応できる熱力学的データベースの整備が進んでいる。しかし、その一方で実験データが不足している一部の相については、2元系や3元系でも相安定性の評価が不十分なままにアセスメントが進んでいる場合もあり、個々の系での相平衡の評価や組織予測のために既存のデータベースの利用には注意を要する。実験値のない化合物相の安定性の評価に第一原理計算の応用が最近行われているが、上記の問題解決への寄与が期待される。また、第一原理や経験的多体ポテンシャルは、粒界および界面エネルギーの理論的評価でも用いられており、相変態や再結晶組織の研究に生かされている。耐熱鋼などでは、超々臨界発電等の目的でさらなる高合金化が進められている。原子力分野等でも压力容器や配管などにステンレス等の高合金が用いられる。これらの材料では、高温での長期間にわたる組織変化を評価する必要があるが、その組織の理解には多元系の拡散や複数相の競合析出などの理論的研究が不可欠である。また、一方で、計算の妥当性の評価に実験的検証が必要なことは言うまでもない。

先述した局所領域の組織解析技術の画期的な進歩は、広い視野での結晶方位・組成・構造の2次元分布の情報を短時間で得ることを可能にした。最近では同一視野の繰り返し研磨・観察と3次元レンダリング技術を組み合わせて、3次元組織形態も容易に再現されている。集束イオンビーム(FIB)加工とエネルギー分散型X線分光(EDX)、EBSPなどを組み合わせると結晶方位・組成・構造の3次元分布を再構築できるようになるが、この手法を用いて微細組織の理解が深まることで制御技術の大きな進展が期待できるのではないかと感じる。2次元での断面観察で得られた情報で今まで常識のように思われてきた知見が覆る状況も出てくるであろう。

今後の鉄鋼材料の開発では、今までにも増して埋もれた技術の発掘と理解が不可欠である。最近の高強度化に対する要求は益々高まっており、ペイナイト・マルテンサイトといった低温変態生成物を主な組織とする材料への傾斜を加速している。しかしながら、鉄鋼のマルテンサイトの特性の研究の多くは40年ほど前に一段落を見せた後、それほど顧みられていない。先人を超える研究開発を効率良く行うためには、膨大な過去の研究成果を紐解いていく必要がある。そうする

ことで、初めて今まで見逃されていた領域での新しい組織制御の可能性が広がるであろう。このためには、大学・研究所・企業のそれぞれが今まで蓄積してきた知識・技術などのノウハウを維持し伝承していくことは最重要課題である。

4.1.2 組織と機械的特性

(1) 最近10年間の研究動向

鉄鋼材料は、Fe-C合金を基本組成として相変態を利用して様々な組織が得られるところに最大の特徴があり、20世紀の鉄鋼材料の分野では、微量の合金元素を添加して相変態を制御するマイクロアロイング技術が研究開発の主流であった。しかし1990年以降、深刻になりつつある地球環境問題への対策として、省資源ならびにリサイクル性の観点から特殊な合金元素を使用しない新たな鉄鋼製造プロセスの開発が望まれるようになった。こうした背景をもとに、金属材料の特性の飛躍的な改善を目指して「スーパーメタル研究会」が1993年11月に通商産業省工業技術院に設置された。その趣旨は、1995～1996年度の産業科学技術研究開発制度による「スーパーメタル先導研究」に継承され、(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)および(財)金属系材料研究開発センター(JRCM)が企業や大学関係者の協力を得て「大型素材(鉄系、アルミ系)」の調査研究を行った。その結果、それまでの限界を打ち破って1 μm までの細粒化に挑戦する結晶粒超微細化技術に関する研究テーマが提案され、1997年度から5ヵ年計画で、同省の支援を受けた「スーパーメタルの技術開発」プロジェクトが動き出した。このプロジェクトは、1 μm 以下の細粒化を達成するためのプロセス技術の指針を得るとともに超微細粒鋼の機械的特性を評価するといった基礎研究に重点を置いたものであった。得られた知見は、2002年から5ヵ年計画で活動を開始した「環境調和型超微細粒鋼創製基盤技術の開発」プロジェクトに活用され、実機での生産を目指した圧延技術や圧延ロールの開発に関する研究が現在も行われている。一方、科学技術庁・金属材料技術研究所(現:物質・材料研究機構)でも、“強度2倍、寿命2倍”をスローガンとして、鉄鋼材料に特化した研究「STX-21(超鉄鋼)」プロジェクトが「スーパーメタルの技術開発」と並行する形で1997年に5ヵ年計画で立ち上げられた。その中で新たな溶接構造用800 MPa鋼の開発という位置づけで、1 μm 以下の超微細粒鋼の創製技術や接合技術に関する研究が行われた。海外でも、「スーパーメタルの技術開発」や「STX-21(超鉄鋼)」のプロジェクトに追従する形で、「Hyper Steel-21」(韓国)や「New Generation Steel」(中国)などの超微細粒鋼の創製技術に関するプロジェクトが立ち上げられた。いうなれば、鉄鋼材料分野でのこの10年間はまさに“結晶粒超微細化の時代”といっても過言ではなく、フ

フェライト単相の鉄や炭素含有量が0.15% Cまでの低炭素鋼については、超微細粒鋼の組織と機械的特性の関係が明らかにされてきた。

(2) 降伏強度の結晶粒径依存性

金属材料の降伏強度が結晶粒径の平方根の逆数に比例して増大することは、Hall-Petchの関係としてよく知られている。図4.1は、粒径が1 μmあるいはそれ以下までの領域を対象とした研究に関して、鉄ならびに低炭素鋼における降伏強度 (0.2%耐力) の粒径依存性をまとめたものである。縦軸の切片に対応する強度 σ_0 は単結晶材料の降伏強度に対応し、合金元素やパーライトの量によって若干異なった値をとるが、粒径依存性を示す傾きは研究者によらずほぼ同じ値を示している。つまり、工業用純鉄や低炭素鋼のようなフェライトを母相とする鉄鋼材料については、降伏強度 σ_y は、真の粒径 d の関数として次式で与えられると考えてよいであろう。

$$\sigma_y [\text{GPa}] \cong \sigma_0 + 0.6 \times d [\mu\text{m}]^{-1/2} \dots\dots\dots (1)$$

ただしこの式は、1) 結晶粒の形が完全に等軸であり、しかも2) 結晶方位がランダムな多結晶鉄にのみ適用でき、形状が等方的でない場合や極端に集合組織が発達している場合には使えないので注意が必要である。これまで、結晶粒微細化強化は鉄鋼材料の強化手段としてあまり注目されなかったが、それは工業的な細粒化の限界が10 μm付近にあり、強化量も約0.2 GPaにすぎなかったためである。しかし、1 μmまで結晶粒を微細化すると低炭素鋼の降伏強度は0.7 GPaに達し、従来の高強度鋼に匹敵する強度を得ることができる。通常の圧延による製造方法で1 μm以下の細粒化を図るのはかなり困難であるが、メカニカルミリング処理した鉄粉を固

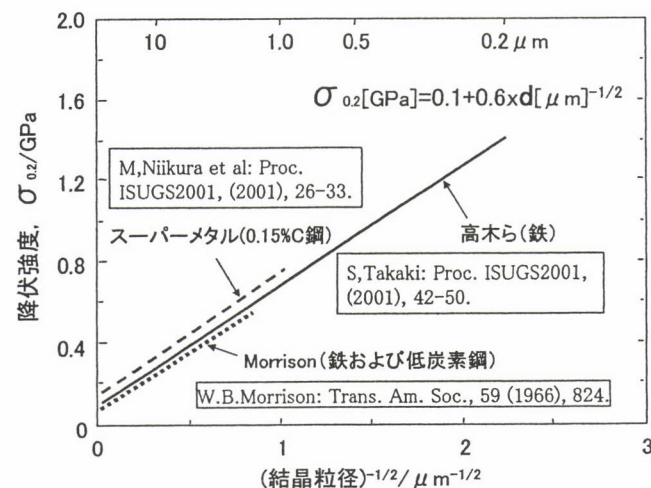


図4.1 鉄および普通低炭素鋼のフェライト結晶粒径と降伏強度の関係

化成型して作製したバルク鉄では0.2 μm付近までの超細粒化が可能であり、少なくとも粒径が0.2 μmまで直線的なHall-Petchの関係が成立することが確認されている。現段階ではこれより微細な粒径のバルク材を作製できないので、降伏強度に関してHall-Petch則の成立限界を見極められないが、メカニカルミリング処理したFe-C合金粉については数nmまでのナノ結晶化が可能であり、図4.2に示すように、Hall-Petch則の成立限界が0.1 μm付近にあることが確認された。直線関係が成立する領域では、硬さと真の粒径の関係は、単結晶の硬さをHV₀として次式で与えられる。

$$\text{HV} [\text{GPa}] \cong \text{HV}_0 + 1.8 \times d [\mu\text{m}]^{-1/2} \dots\dots\dots (2)$$

0.1 μm以下の粒径領域で硬さの上昇が頭打ちになるのは、鉄の変形に粒界すべりが関与するようになるためと考えられ、鉄の結晶粒微細化強化は硬さに関してHV12 GPa (引張強さで約4 GPa相当) が限界といえる。

(3) 延性/脆性遷移温度の結晶粒径依存性

bcc構造の金属材料が室温以下の低い温度域で脆くなる現象は低温脆化として知られており、降伏強度が低温域で急激に上昇して脆性破壊強度を上回ることによって脆性破壊が引き起こされる。破壊挙動が延性から脆性に遷移する延性-脆性遷移温度 (DBTT) は、一般に材料の強度が高くなると高温側に移行するのが普通であるが、結晶粒微細化だけは、材料強化と同時にDBTTをも低下させる働きをする。図4.3は、低炭素鋼 (0.15% C鋼) の結晶粒径とDBTTの関係を示している。DBTTも結晶粒径の平方根の逆数に比例して直線的に低下しており、粒径を1 μm程度にまで細粒化した材料では、

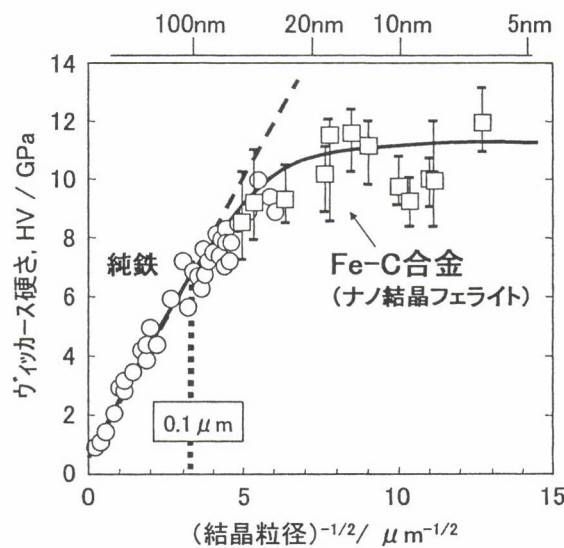


図4.2 フェライト鉄の硬さと結晶粒径の関係 (ナノ結晶化したFe-C合金はフェライト単相となっている)

液体窒素温度でも脆性破壊を起こさないことが確認されている。材料の基地の性質によっても DBTT は影響を受けるので、DBTT と結晶粒径の関係を一義的に決定することはできないが、実用的な低炭素鋼については $2 \sim 3 \mu\text{m}$ までの細粒化によって十分な低温靱性を確保できる。ここで注意すべき点は、過度の細粒化は過剰な強化を引き起こして延性の低下を招くことである。とくに粒径が $1 \mu\text{m}$ 以下になると均一伸びが極端に小さくなり、くびれ変形が主体的に起こるようになる。

結晶粒微細化によって脆性破壊が抑制されるのは、図4.4に示すように、降伏強度と脆性破壊強度の粒径依存性が後者の方が大きく、降伏強度の上昇を上回る強靱化が結晶粒微細化によってなされるためである。図中で降伏強度と脆性破壊強度が交わる粒径は、破壊機構が変化する臨界粒径に相当し、材料を安全に使用するためには材料の結晶粒径を臨界粒径よ

り細くなるように制御せねばならない。ひずみ速度を大きくしたり材料の強度を高めたりすると臨界粒径は当然のことながら微細粒側に移行する。このことは、十分な靱性を確保するうえで結晶粒の微細化が不可欠の要因であることを示唆しており、今後、鉄鋼材料の更なる高強度化を図る場合、安全性の観点からも結晶粒の微細化に注意を払うことを忘れてはならない。

4.1.3 計算材料科学

(1) 研究動向

日本最大のスーパーコンピュータである「地球シミュレータ」の演算性能は40TFlops (1秒間に40兆回の浮動小数点演算)であり、最近まで世界最高であったが、2004年11月のランキングでは、米国のBlueGene (91 TFlops) 及びColumbia (60 TFlops) に次ぐ世界第3位となった。このように電子計算機の発展は著しく、計算科学は大規模化・高精度化を進め、単純な原子・分子や単結晶から複雑なナノスケール構造のシミュレーションへと拡大している。計算科学手法は対象となる物質のサイズと現象の時間スケールでみて、図4.5に示すように分類される。電子レベルを対象とする第一原理計算、原子や分子の集団運動を扱う分子動力学法(MD)やモンテカルロシミュレーション(MC)、バルク材料を対象とする有限要素法(FEM)や統計熱力学計算、ミクロとマクロの間を繋ぐメゾスケールを扱うPhase-field法などである。

2003年に策定された日本鉄鋼協会の鉄鋼科学技術戦略ロードマップでは、特に1) ナノ析出物制御、2) 加工・熱処理中の材質変化予測、3) 変形破壊のミクロ機構説明、4) 特性極限化のための組織制御、5) 機械的性質、機能特性の予測などで、計算科学手法への強い期待が述べられている。鉄鋼材料の場合、組織形成や特性に関与する構成相や相変態、析出等の数と種類が極めて多岐にわたるため、全ての素過程を

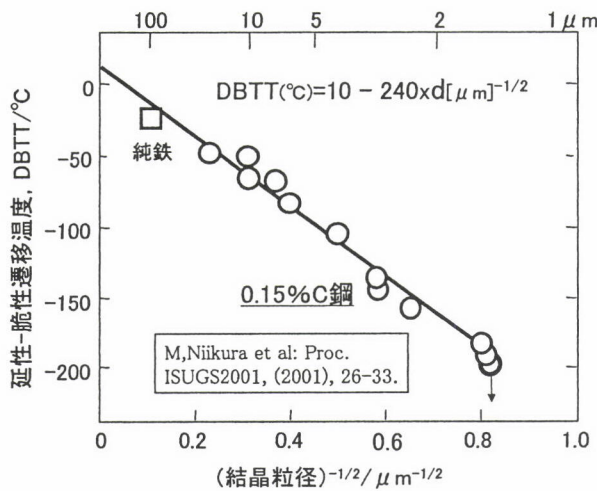


図4.3 低炭素鋼のフェライト結晶粒径と延性-脆性遷移温度（エネルギー遷移温度）の関係

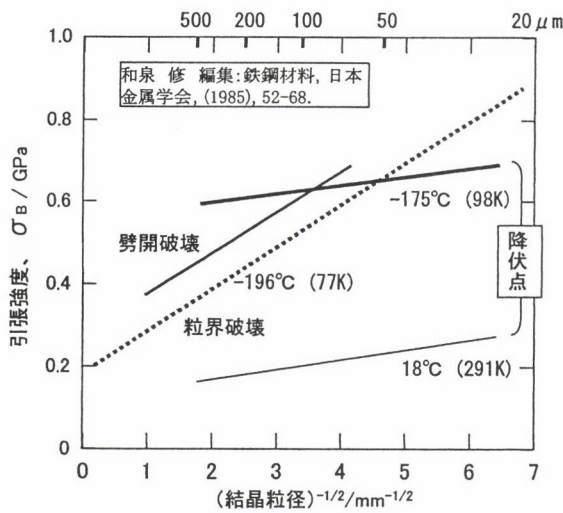


図4.4 降伏強度と脆性破壊強度のフェライト粒径依存性

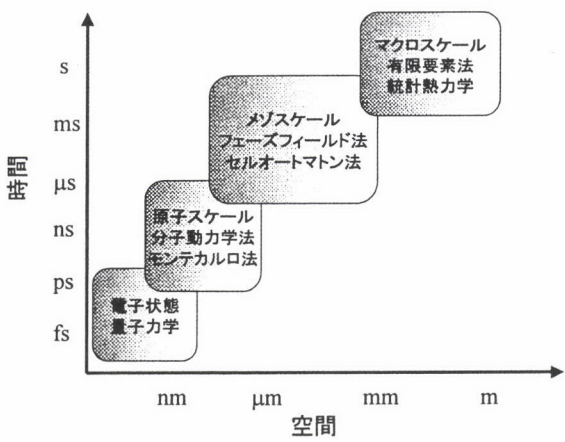


図4.5 計算科学手法の時間及び空間スケール