

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

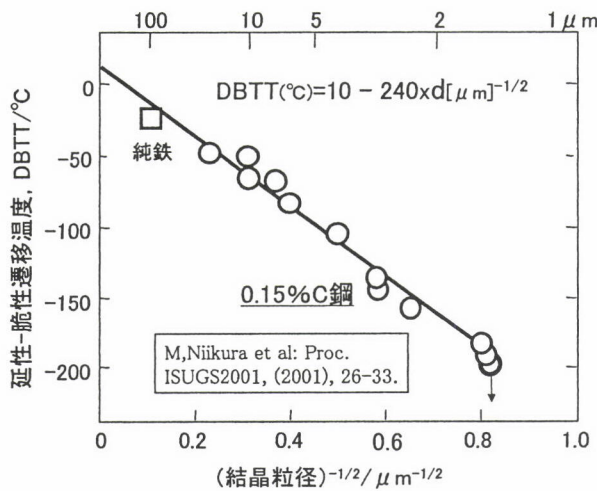


図4.3 低炭素鋼のフェライト結晶粒径と延性-脆性遷移温度（エネルギー遷移温度）の関係

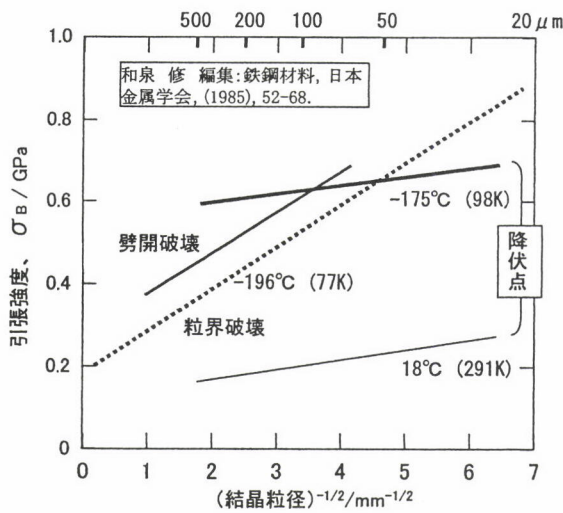


図4.4 降伏強度と脆性破壊強度のフェライト粒径依存性

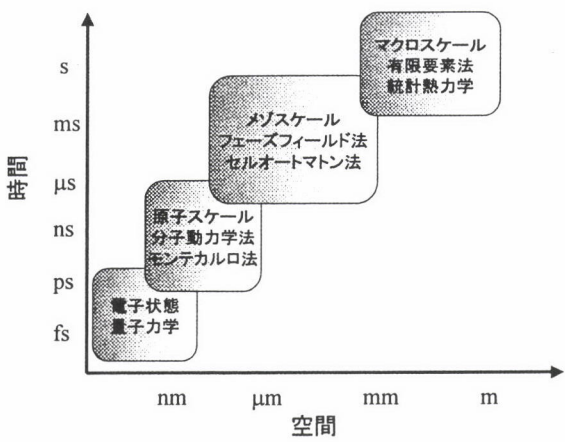


図4.5 計算科学手法の時間及び空間スケール

理論的なシミュレーションで予測することは難しい。しかし、熱力学計算手法の発展、データベースの整備、動力学解析手法の進歩、マルチスケール解析手法の進歩など、近年の計算科学の進展はめざましく、複雑な鉄鋼材料においても組織や特性の予測が可能となりつつある。

(2) 第一原理計算

量子力学の支配方程式であるシュレディンガー方程式を解いて、原子の種類だけから電子構造を求め、様々な物性を予測する計算を第一原理計算と呼ぶ。高精度の膨大な計算を要するため適用範囲は限定されてきたが、線形化法や擬ポテンシャル法の開発で、数百～数千個程度の多原子系のバンド計算が可能となってきた。しかし、鉄の安定相が強磁性bcc相となることが計算可能となったのは比較的最近であり、1990年頃、Generalized Gradient Approximation (GGA) 近似理論が出されてからである。WuとFreemanは鉄の粒界脆化に及ぼす不純物元素の影響についてFLAPW (Full-potential Linearized Augmented Plane-Wave) 法による第一原理計算を行い、Pが脆化傾向を示し、C、Bは粒界強化傾向を示す原因が、CとBは粒界に偏析して強固なC-FeやB-Fe結合を作るのに対し、Pは強固なP-Fe結合を作らないためであることを明らかにした。

最近のトピックスとしてTateyamaとOhnoによるbcc鉄の水素脆化に関するモデリング提案がある。bcc鉄中の水素と空孔の相互作用について第一原理計算を行った結果、水素2原子と空孔1個のクラスターが最安定構造であり、さらに、このクラスターは、(100)や(110)面に平面的に集合する方が塊状となるよりも安定なことが明らかにされた。bcc鉄のへき開破壊の核となることが予想される。

(3) 粒子シミュレーション

ニュートンの運動方程式に基づいて、原子や分子の集団としての振舞いを調べるのが分子動力学 (MD) 法であり、2体分布関数などの構造因子、拡散係数、粘性係数などの輸送係数、体積弾性率、比熱、自由エネルギーなどの熱力学的性質などの様々な物性値の計算や、相変態、変形挙動の解明に適用されている。MD法で扱える時間と空間には限りがあり、最長でもnsの時間であり、経験的ポテンシャルを使った場合でも、最大で1億個程度である。材料科学への応用に関しては、bcc鉄の低温脆性及び水素脆性、ボロン添加による粒界破壊の防止などについてMDシミュレーションによる数多くの研究があり、解析に基づくメカニズム提案がなされている。

SuzukiとShimonoはクラスターを対象として、レナード・ジョーンズ (L-J) ポテンシャルにより、A-B2元系合金

のB2-L1₀変態挙動を調べ、クラスターサイズ (原子数) の減少とともにマルテンサイト変態開始温度と融点の双方が低下することを明らかにした。また、鉄クラスターにおけるfcc→bccマルテンサイト変態過程を調べ、変態は常に表面から発生して内部に進行すること、また、表面における渦状の原子の集団運動が変態核発生に寄与しているとの知見を得た。

結晶粒径がナノの領域では、粒径の減少とともに降伏強度が低下する逆ホール・ペッチ則が注目されている。Schiotzらは有効媒質法による多体ポテンシャルを用い、10万原子を使ったMDシミュレーションを実施し、この逆ホール・ペッチ則を再現した。粒径の低下により粒界領域の割合が増加し、粒界滑りの寄与が大きくなることを明らかにした。また、粒内に積層欠陥が多く発生し、粒内変形への部分転位の関与を予言した。後に、ナノ結晶Alにおける積層欠陥と変形双晶の生成が、LiaoらやChenにより高分解能電子顕微鏡観察で確認されている。ナノ結晶の変形のように、実験の困難な現象の解明には、シミュレーションによる理論的な予測とターゲットを絞った実験的検証が有効である。

(4) 統計熱力計算から組織形成ダイナミクス

状態図は材料開発に不可欠であり、多くの系について実験により求められてきた。全ての多元系状態図を実験で求めることは不可能であるが、近年、熱力学モデルの高度化と計算機性能の向上により、CALPHAD (CALculation of PHase Diagram) 法と呼ばれる状態図計算手法が著しい発展を遂げている。熱力学データベース、平衡計算機能、作図機能を併せたシステムとして、Thermo-calc, ChemSage, F*A*C*T, Pandatなどが商用ソフトウェアとして販売されており、複雑な多元系実用合金の状態図を精度良く再現できるため、材料開発や解析に活用されている。

現在の課題の一つは熱力学データベースの充実であり、Pbフリーはんだ合金データベースなど先端材料開発に不可欠なデータベースが開発されている。また、熱力学モデルに関しても大きな進展が見られる。固溶体合金中に存在する不均一性 (短範囲規則度) を取り扱うために菊池によって開発されたのが、原子の分布を点ではなく、原子の対や三角クラスターの単位で考えるクラスター変分法 (Cluster Variation Method, CVM) である。第一原理手法による状態図計算は学術的に重要であるが、極めて膨大な計算を必要とする。従って、熱力学データの測定値が無い場合に、第一原理計算による計算結果をCALPHAD法のデータベースに変換して予測する方法が現実的である。

平衡状態における安定相に関しては高精度な予測が可能となってきた。しかし、材料組織の予測や制御には、状態図に

よる平衡組織の情報だけでは不十分であり、時間とともに変化する組織の予測手法が必要である。フェーズフィールド法は、組織の形態を濃度や規則度等の複数の変数で表現し、その時間・空間変化を発展方程式に基づいて計算することにより組織形成過程を解析する方法である。フェーズフィールド法により、現実の材料における様々な組織形成過程のダイナミクスが次々と解明され、実用的な合金系での組織予測が可能となりつつある(図4.6参照)。

有限要素法(FEM)による圧延プロセスシミュレーションは、剛塑性FEMにより、ほとんど全ての熱間圧延加工時の三次元定常塑性流動の解析が可能である。しかし、FEMによって計算されるひずみ速度、温度の分布を加工中の材質変化に反映させるのは簡単ではなく、動的再結晶、多パス加工時の再結晶等を考慮した解析がなされたのは1990年代に入ってからである。板圧延や鍛造における、オーステナイト相の結晶粒変化やフェライト・パーライト変態後の組織変化が解析されている。現在、FEMを核とした内部組織変化の解析を行う上で、再結晶速度定数、回復速度等の材料情報が不足している。この材料情報を化学組成の関数としてフェーズフィールド法、MD法等により理論的に求めることができればマクロな組織予測が飛躍的に進展する。機械的性質の予測に関しても、塑性変形の素過程を記述した上でマクロな変形をモデル化する様々な手法が開発されており、均質化法、結晶塑性理論、転位の拡散方程式を解析することで、結晶粒内部での転位分布やサブグレイン形成も含めた多結晶体の変形解析が可能となっている。

(5) 今後の展望

ミクロからマクロに渡る時間及び空間スケールを対象とする計算科学手法の進展について、できる限り鉄鋼材料に焦点を当てて紹介した。最近の計算科学手法の高度化、特にフェ

ーズフィールド法に代表される動力学解析法の進展により、実用的な合金系での組織予測が可能となりつつある。また、有限要素法を核とした組織や変形解析でも大きな進展がみられ、各スケールでの手法の有効なリンクにより、多くの現象が複雑に絡み合う鉄鋼材料においても、組織と特性の理論的なシミュレーションによる予測が手に届くところに来ている。

4.2 鋼種別鉄鋼材料および境界材料の進歩

4.2.1 薄鋼板

(1) この10年の研究動向

薄鋼板の材料開発のここ10年の歩みと現状を数例のホットな話題を入れて紹介する。ここ10年の間にISIJ Internationalと鉄と鋼に掲載された薄鋼板の材料開発に関する論文調査によると、ISIJ Internationalには約100編強、鉄と鋼にはその約半数が掲載されていた。掲載内容には以下のような特徴が認められた。①IF (Interstitial atom free) 鋼に関わる論文が一番多く、特に集合組織ならびに r 値を対象にした研究が多い。②次に多い鋼種はTRIP (Transformation induced plasticity) 鋼で大学を中心に特性の改善に関する論文が多い。③材質予測制御関連の論文が1990年代後半までは多かったが、その後は比較的少ない。④フェライト域熱延を対象にした論文も10編ほど見られた。この結果は明らかに最近の10年間の企業での研究開発活動の内容を反映していない。①、③、④はすでに10年前にピークを迎えた研究開発である。

実際の薄鋼板の研究開発の動向でみると、最近の各鉄鋼メーカーの技報に見られるように自動車車体の軽量化を実現するためのハイテンの開発が精力的に行われた。各自動車部位のハイテン化について自動車メーカーにアンケート調査した結果、アウターパネルは490 MPa、構造部材は980 MPa、足回り部材は780 MPa、そして補強材は1760 MPa材の適用が当面の数値目標として挙げられた。この目標を達成するには必要強度を有し、部品成形、組み立てに必要な成形性、溶接性を有する鋼板の開発がターゲットになる。以下に各部材のハイテン材の開発状況について注目技術を中心に紹介する。

(2) 外板パネル用鋼板

外板の板厚は指などで押された時に凹まない耐デント性が要求されるが、板厚を減じて、耐デント性を確保するには降伏強度YPを高める必要がある。しかし、YPが高くなると厳しい加工を受けた近傍に面ひずみが生じやすくなる。この耐

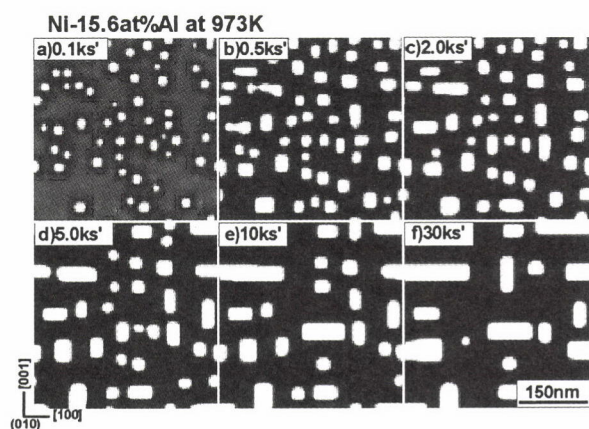


図4.6 Ni-Al合金における γ' 析出相組織形成過程のフェーズフィールド法による二次元シミュレーション。973K等温時効。(ふえらむ, 9 (2004), 497.)