

先端解析および計算材料科学を用いた 加工・再結晶に関する最近の研究と将来展望

Recent Progress and Future Perspective of Research on Deformation and Recrystallization in Steel Exploiting Cutting-edge Analytical Technology and Computational Material Science

潮田浩作
Kohsaku Ushioda

日鉄住金総研(株) シニアアドバイザー
金沢大学 客員教授
大阪大学 特任教授
物質・材料研究機構 NIMS 特別研究員

1 緒言

第219・220回西山記念技術講座「材料設計を先導する物理解析技術・計算科学」においては、最近の物理解析技術や計算材料科学の進歩を俯瞰し、最先端の電子顕微鏡や量子線を用いた解析、および第一原理計算やPF (Phase Field) 法などの計算材料科学が紹介され、さらにこれらを融合した新しい材料設計技術の方向性が議論された¹⁾。筆者はそこにおいて、鋼材の一貫プロセスにおける組織や集合組織の発達、および特性・表面品位の評価技術について、EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) の進歩を中心に最近の技術を紹介し、将来への期待について述べた。本報告では、一貫プロセスの中でも特に加工・再結晶と集合組織形成プロセスに焦点を当て、直近の物理解析技術や計算材料科学の進展を利用した研究例を紹介し将来を展望したい。

加工・再結晶は、組織微細化や集合組織制御と密接に関係するため、優れた特性と品質を有する高付加価値な鋼材を製造する上で、凝固、相変態や析出と並びきわめて重要な冶金現象である。すなわち、加工・再結晶は、強度と加工性や靱性との両立、磁気特性の向上、ならびに表面品位の確保の上で、工業的にもきわめて重要である。

組織を微細化するための基本コンセプトはTMCP (Thermo-Mechanical Controlled Process) であり、工業的には制御圧延と制御冷却により①再結晶や変態の核生成頻度を増加させ、かつ②成長を抑制させることがポイントとなる。集合組織を制御するには、核配向選択成長説に立脚すれば、特定の結晶方位を有する再結晶粒の核生成サイトの提供や核の方位選択的成長が可能な環境の提供が基本となる。これらに共通して言えることは、不均一加工組織の制御が最も基本となる点で

あり、再結晶のみならず相変態においても核の生成や成長の観点から加工組織の不均一性はきわめて重要である。

学術的にも、加工・再結晶は未開拓の所が未だ多くあるように思える。まず、塑性変形後の不均一加工組織は複雑であり、その形成メカニズムの理解や予測技術は不十分である。また、再結晶機構についても、静的再結晶と動的再結晶、あるいは連続再結晶と不連続再結晶現象、さらには不連続再結晶にも高エネルギーブロック説と低エネルギーブロック説があり複雑であり、正確な理解が十分進んでいるとは言えない。すなわち、不均一加工組織からのサブグレインの成長と再結晶核の形成、さらには核の成長、すなわち再結晶粒/未再結晶粒界面の移動と界面性格、および界面移動に及ぼす固溶原子や析出物の影響などは必ずしも十分理解されていない。また、集合組織の形成機構についても核配向説と配向成長説の両説があるが、統一的理解には至っていないと思われる。再結晶後の粒成長にともなう集合組織の変化についても、粒界エネルギーや粒界易動度の粒界性格依存性の全貌が不明なため、本質的には課題が残っていると考えられる。

本報告では、進歩の著しい物理解析技術や計算材料科学を利用した本分野の最近の研究例を紹介し、今後の取り組むべき方向性について将来を展望する。

2 先端解析技術を用いた 加工・再結晶の研究例

2.1 不均一加工組織

多結晶体の圧延後の加工組織はきわめて不均一である。すなわち、結晶粒により変形が異なるのに加え、例えば結晶粒界近傍、結晶粒内のせん断帯や遷移帯および双晶境界近傍、さら

には硬質第二相近傍などに代表される場所においては、局所的に変形が不均一となる²⁾。加工組織は、注目する結晶粒の方位と形態、およびそれを取り囲む隣接粒による拘束や硬質第二相の存在の影響を受けるため、上記のように複雑となる。再結晶は加工組織の中でも、一般的に不均一性の高い高ひずみ領域から核生成する。また、加工された母相からの相変態においても、新相はこのような不均一領域から優先的に形成される。したがって、加工組織の不均一性はきわめて重要となる。

結晶粒界近傍における圧延組織の不均一性について、阿部らが先駆的な研究を行った³⁾。また、彼らはND//<111>再結晶粒の優先核生成に初期結晶粒界が重要な役割を果たすことも示した。ここで、ND (Normal Direction) は板面法線を示す。粒界近傍では歪の連続性を保つために多重すべりが生じ、転位密度が局所的に高くなり硬さが増す場合が一般的に多い。しかし、隣接方位関係によっては軟らかくなる場合もあることが指摘されている³⁾。EBSDを利用した最近のTi-IF (Interstitial Free) 鋼を用いた研究⁴⁾によれば、図1に示すように初期結晶粒界近傍での不均一性は、①平滑な粒界、②不規則に凹凸のある粒界、③微細粒をともなう粒界、の3種類に分類された。解析対象とした84の粒界について結晶方位情報を反映したAsB (Angle Selective Backscattered Electron) 像も考慮し統計的な解析を行った結果、粒界近傍の不均一性はND//<111>方位粒とRD//<011>方位粒の塑性変形の差に基本的に起因すると推察されている。ここで、RD (Rolling Direction) は圧延方向である。しかし、上記結晶方位に至るまでの結晶回転を含む定量的な評価までには至っていない。また、粒界における微細粒の存在は特筆されるべき新発見であり、粒界近傍での変形の集中と動的回復が関与し

ていることが推察されている。

結晶粒内においても、結晶方位は場所的に変化する。その様子は、図1示した結晶方位マップの変化からも認められる。中でも、RD//<011>方位粒は比較的方位の揺らぎが小さい。これは、再結晶粒の核生成がRD//<011>方位粒ではきわめて困難であることを示唆する。一方、ND//<111>方位粒は方位揺らぎが大きく、再結晶粒は容易に形成される。また、結晶粒内には周囲と大きな方位差を持つせん断帯が形成される場合がある⁵⁻⁷⁾。(111) [11-2] Fe-3mass% Si (以降、mass%を省略) 単結晶を圧延するとせん断帯が形成されることは周知であるが、圧下率の増加にともない既存のせん断帯は圧延面に平行に傾こうとする。また、圧延方向から約35°の角度を持った新たなせん断帯が形成される⁷⁾。冷間圧延素材にCが固溶状態で存在すると、{111} <112>結晶粒に明確なせん断帯が形成される⁶⁾。図2から明らかなように、せん断帯に

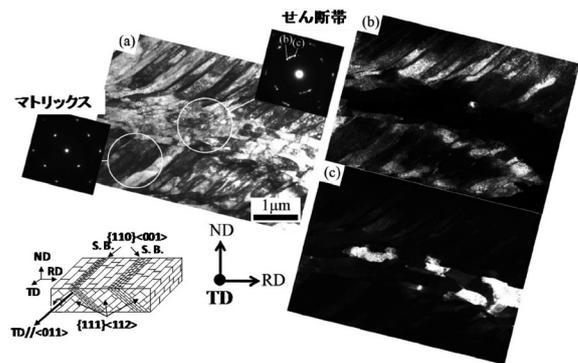


図2 Fe-0.02Cを700℃から水冷した素材を70%冷間圧延後に観察されたせん断帯のTEM像⁶⁾とその模式図。(a) 明視野像、(b) 暗視野像 (回折スポット)、(c) 暗視野像 (回折スポット)

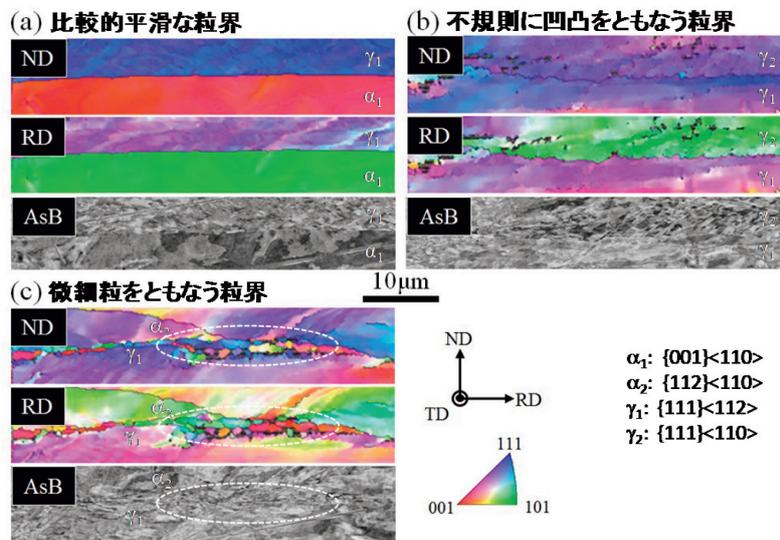


図1 Ti-IF鋼を70%冷間圧延した後の結晶粒界近傍における変形の不均一性を示すEBSD方位マップとAsB像⁴⁾。

おいてはせん断変形が局所的に集中しており、せん断帯内部では $\{110\} \langle 001 \rangle$ まで方位回転した領域が局所的に存在する^{5,7)}。また、 $\{110\} \langle 001 \rangle$ 再結晶粒がせん断帯から核生成することも報告されている^{5,7)}。さらに、動的ひずみ時効条件下で圧延すると、せん断帯の形成が促進されることも知られている^{5,8)}。これは、動的ひずみ時効条件下で変形すると歪速度感受性指数 (m) が負となるため、変形の局在化がさらに進行するためと考えられている^{8,9)}。

初期方位が $\{100\} \langle 001 \rangle$ の結晶粒においては、圧延方向と平行に筋状組織、すなわち遷移帯が形成されることが知られている¹⁰⁾。これは、圧延にともないND// $\langle 001 \rangle$ 軸回りに左右に45°方位回転した $\{100\} \langle 011 \rangle$ 方位を持つ領域が形成され、その間に初期方位を維持した領域が残存するためと考えられている。このような遷移帯は、 $\{100\} \langle 001 \rangle$ 再結晶粒の核生成サイトとして重要な役割を果たす¹⁰⁾。

Fe-3Si鋼を冷間圧延するとC量の増加と共に変形双晶の密度が増大し、変形双晶は $\{411\} \langle 148 \rangle$ 方位粒の核生成サイトとして重要な役割を果たすことが報告されている¹¹⁾。

硬質第二相周辺はきわめて複雑な変形をする。まず、Fe-17Cr鋼を二相域から水冷しフェライト (α) とマルテンサイト (α') からなる組織を得た¹²⁾。比較のために α' の焼戻し処理も加えた。これらを、75%冷間圧延すると、図3に示すように硬質第二相 (α') の周辺にひずみが集中するが、歪の集中度は α' と母相 (α) とのピッカース硬さ (Hv) の比が大きいほど増す¹²⁾。すなわち、硬さ比が大きいと図3 (a) のように α' は殆ど変形することができず α' の周囲に著しく歪みが集中する。一方、図3 (b) に示したように550℃で焼戻し処理をすると焼戻し α' は変形が相対的に容易となるので、界面への歪の集中度は低下する。硬質第二相界面は、ランダムな方位を有する再結晶粒の核生成サイトとして働き、さらにRD// $\langle 011 \rangle$ コロニー組織を分断する結果、Fe-17Cr鋼の本

質的な課題であるリジングの発生を防止し表面品位を改善することが知られている¹²⁾。

粒界近傍、せん断帯や硬質第二相近傍のように、変形がきわめて複雑で微細な構造を有する領域の結晶方位解析には、通常の反射EBSDでは限界がある。透過EBSD解析やTEMによる自動方位マッピング解析¹³⁾が提案されている。後者は、例えばスポットサイズ5nm、ステップサイズ10nmで電子線を走査させ自動方位解析することが可能となるので、微細構造を有する領域の詳細な結晶方位解析に適すると考えられる。

2.2 EBSDを用いたオーステナイト (γ) 相の再構築と γ の加工・再結晶

組織制御のためには、 γ における加工・再結晶の正確な把握が重要となる。しかしながら、 γ から α へ相変態する鋼においては、高温での γ の加工・再結晶を直接見ることは困難であった。そこで、 γ を凍結して得られる α' のEBSDデータから γ 相を再構築する技術¹⁴⁾を利用して、 γ の加工・再結晶や結晶方位解析が可能となった。その一例を、図4に示す¹⁵⁾。Vが無添加の0.55C-1.5Si-0.7Mn-0.7Cr鋼と、それに0.1Vを添加した鋼を1200℃に加熱後、 γ 相の800℃まで急冷しその温度で一段目の圧縮加工 (歪 $\epsilon = 0.3$) を施し任意の時間保定した後、同じ温度で二段目の圧縮加工 (歪 $\epsilon = 0.3$) を行った。一段目の加工前、加工直後および保定後に水冷して、 α' 組織を凍結し観察した。縦軸は、保定中の軟化率 $X = (\sigma_{\epsilon} - \sigma_{y2}) / (\sigma_{\epsilon} - \sigma_{y1})$ の時間変化を示す。ここで、 σ_{y1} 、 σ_{y2} および σ_{ϵ} は、一段加工、二段加工時の降伏応力、および一段加工時の最大流動応力である。加工前の初期組織は約100 μm の等軸粒から成り、焼鈍双晶が明瞭に見られる (図4 (a))。加工直後は、圧縮方向に扁平した不均一な加工 γ 組織が認められる (図4 (b))。V無添加鋼は加工後直ぐに γ 相の軟化が始まり、800℃ - 10 s の保定で γ 粒界や粒内の焼鈍双晶やせん断帯と

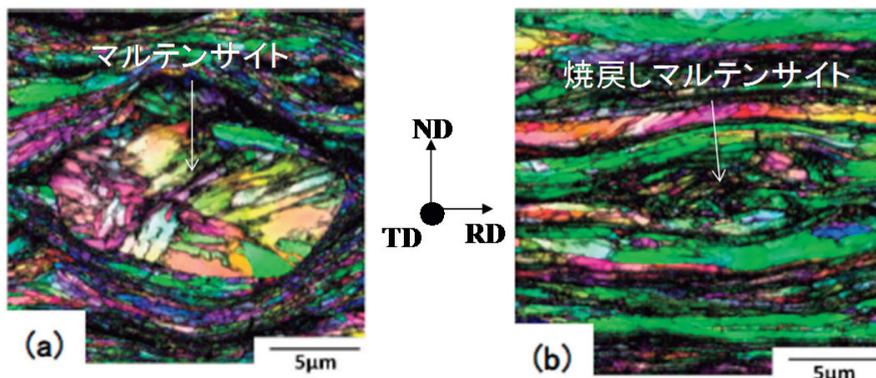


図3 0.07C-17Cr鋼の75%冷間圧延後のEBSD方位マップ¹²⁾。(a)二相域1050℃より水冷のまま。Hv (α) = 205、Hv (α') = 420、(b)その後550℃-1h焼戻し。Hv (α) = 180、Hv (α') = 295

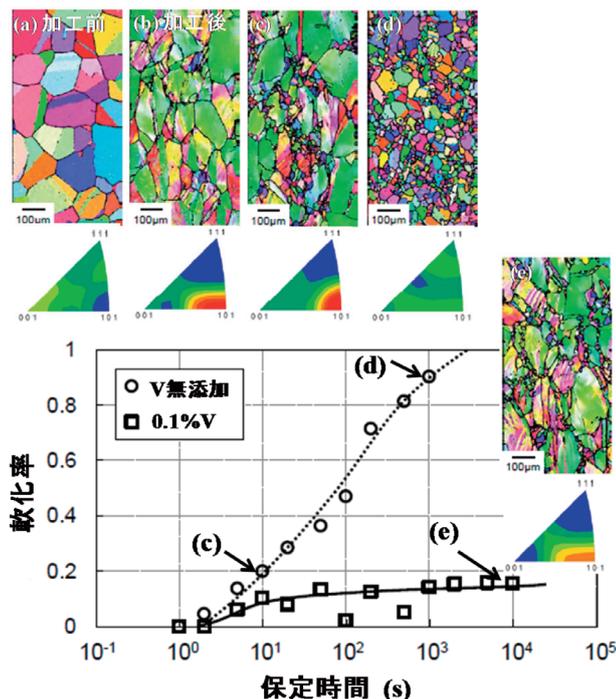


図4 0.55C鋼 (V無添加、0.1V) を800℃ (γ) で熱間圧縮変形 ($\epsilon = 0.3$) した後の静的軟化挙動、および α' のEBSDデータから再構築した γ 相の方位マップ (CD) およびその逆極点図¹⁵⁾。圧縮軸 (CD) は左右方向

思われるところから再結晶粒が核生成し (図4 (c))、 10^3 sの保定後には再結晶が完了している (図4 (d))。一方、0.1V鋼では著しく軟化が抑制され、 10^4 sまで保定しても γ の再結晶は抑制され初期段階に留まっている (図4 (e))。また、未再結晶 γ 相はCD// $\langle 011 \rangle$ の圧縮集合組織を有するが、再結晶した γ 相の集合組織は弱くなることも明らかである。ここで、CD (compression direction) は圧縮方向を示す。本手法により、 γ 相の再結晶研究が一層進むことが期待される。また、Vの回復・再結晶抑制機構は、アトムプローブ (AP: Atom Probe) でも確認できないような微細なV-Cクラスターに起因すると推察されるが、その実態は必ずしも明確ではない¹⁶⁾。マイクロアロイの正確な効果については、今後の課題と考える。

2.3 再結晶/未再結晶界面への溶質元素の偏析と界面移動

核生成した再結晶粒の移動は、界面への合金元素の偏析に起因するソリュートドラッグ効果やピンニング粒子によるピン止め効果により抑制されることが知られている。しかし、移動界面の実態を把握することは困難であった。最近、B添加Ti-IF鋼を例に、再結晶/未再結晶粒の界面におけるAP解析が適用された¹⁷⁾。Ti-IF鋼においては、Ti単独よりTiとBが共存すると著しく再結晶が抑制されることが報告されている¹⁸⁾。すなわち、両元素の複合添加により核生成までのインキュベーション時間が長くなると同時に、再結晶核が未再結

晶領域に成長 (核成長) する速度も低下する¹⁸⁾。既に述べたように、回復から再結晶核生成段階におけるマイクロアロイの影響については現状では解析手法に課題が残るので、ここでは核成長に及ぼすTiとBの影響に焦点を絞る。3DAP観察に用いた材料は、過剰Ti量をほぼ0.03%と一定とし、B量を無添加から14 massppmまで変化させたTi-IF鋼である。再結晶分率が約5%の材料において、大角の再結晶/未再結晶粒の界面が解析領域に確実に存在することを、EBSDおよびFIB法により確認した。観察に用いた0.0018C-0.051Ti-0.0014B鋼の再結晶粒と未再結晶粒の界面には、TiとBの両方の元素の偏析が見られ、Ti-B系の析出物は確認されなかった。また、0.0023C-0.052Ti-0.0001B鋼では、界面へのTiの偏析は認められたが、0.0014B材と比較してTiの偏析量が少ないことを確認した。Bの偏析量の増加と共にTiの偏析量が増していることが明確に認められ、BとTiの共偏析が示唆された。Tiは、単独添加の場合よりBと共存することにより偏析量が増し、ソリュートドラッグ効果が強くなることにより界面の移動速度が著しく低下することが初めて明らかとなった。一方では、 α -Fe ($1\bar{1}1$) $\Sigma 3$ [11 0] 対称傾角粒界を対象とした第一原理計算により、結晶粒界においてはB原子とTi原子の間に引力の相互作用が生じ、両者が共偏析する傾向が明らかとなった¹⁸⁾。また、このような引力相互作用は、粒界においてB原子とTi原子が近接した際、Ti原子のポロノイ体積が増加しB原子のポロノイ体積が減少することに起因すると推察されている¹⁸⁾。

2.4 析出、再結晶および $\alpha \rightarrow \gamma$ 逆変態の競合現象を考慮した高強度鋼板の組織制御

鋼材の高強度化の進展は著しく、その取り組みは今後も激化すると予想される。したがって、高強度鋼板の組織と特性の制御は、今後ますます重要となる。ここでは、冷間圧延・焼鈍プロセスにより製造される高強度鋼板を対象とする。このようなプロセスにおいては、 α の再結晶と α から γ への逆変態との競合に加えて、これに析出が重畳した三者の競合現象を理解することが必要となる。

例えば、Ogawaら¹⁹⁾は、0.1C-0.02Si-2.0Mnのベイナイト組織から成る鋼を素材に67%の冷間圧延とそれに続く焼鈍を行い、組織の発達を基礎的に調査した。二相域の750℃における等温焼鈍時の保定時間に伴う再結晶 α (KAM (Kernel Average Misorientation) $< 1^\circ$) 分率の変化を図5 (a) 示す。 α の再結晶は時間と共に進行するが100 sから1000 s付近で一旦再結晶の進行が停滞する。図5 (b) および (c) に示したEBSDのIQ (Image Quality) マップから明らかなように、逆変態 γ は α のサブグレインや再結晶 α /未再結晶 α の界面に形成される。その結果、 α の再結晶の進行が γ の存在により

抑制されることを明らかとした。その後、時間の経過とともに γ はOstwald成長し、 α の再結晶は再び進行し再結晶が完了する。最終的には、再結晶 α と γ （焼入れると α' ）から成る二相組織が得られることになる。

このような鋼に0.02Nbや0.05Nbを添加すると、組織形成は大きな影響を受ける²⁰⁾。焼鈍中におそらくNb-Cクラスターが先行して形成され、図6に示すように α の回復・再結晶は著しく抑制される。その結果、 α は未再結晶のまま γ へ逆変態することになる。このように形成された微細 γ とNb-Cクラスターとの相乗効果により、 α の再結晶はさらに抑制され、最終的には微細な再結晶 α 組織が形成される。また、Nb添加により上記したように α の再結晶が抑制されるため、逆変態 γ の核生成頻度が増し γ の変態率も高くなる。このように、Nb添加により微細再結晶 α と高分率の γ から成る組織が得られることが説明された²⁰⁾。

2.5 X線ラインプロファイル解析による加工・回復・再結晶時の転位挙動の評価

X線ラインプロファイル解析から、転位の性格ごとの転位密度や転位配列などが評価できる²¹⁾。ここでは、本手法を、99.8%の強圧下冷間圧延した純Fe、F-0.3Si合金およびFe-0.3Al合金へ応用した例を示す²²⁾。

強圧下の冷間圧延を施すと、通常の圧下率の場合と異なり

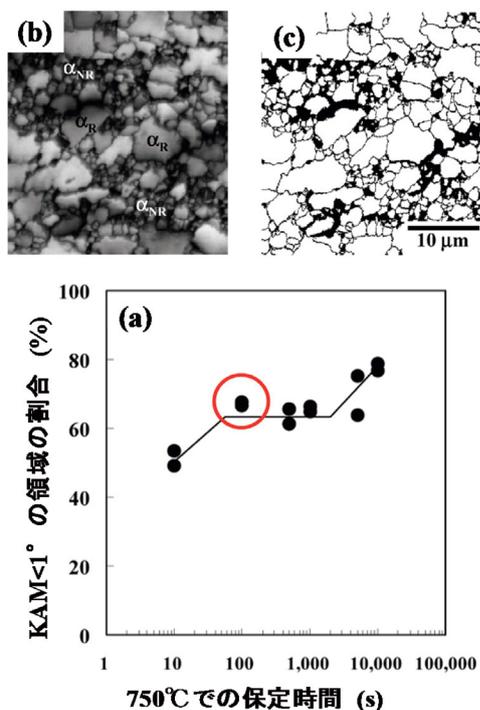


図5 (a) 0.1C-0.02Si-2.0Mn 鋼70%冷間圧延板の750°C等温焼鈍時の α 再結晶(KAM<1°領域)の時間変化¹⁹⁾。再結晶停滞領域(100s)における(b)IQマップ、(c)逆変態 γ

α ファイバー組織が再結晶し、 $\{100\} \langle 012 \rangle$ や $\{411\} \langle 148 \rangle$ 集合組織が形成される²²⁾。また、純FeにSiを添加すると冷間圧延のままの状態において、刃状転位密度が相対的に増加することがX線ラインプロファイル解析から明らかとなった。これは、Siが交差すべりを抑制するためと推察されている。図7に示したように、Fe-0.3Si合金では、低温(200°C)の回復段階から刃状転位密度が低下する。これは原子空孔を活用した刃状転位の上昇運動による合体消滅を示唆すると推察されている。また、400°C以上においては、らせん転位密度が著しく低下して再結晶が進行する。一方、純Feではらせん転位密度の低下はさらに低温の300°C程度から生じることが明らか

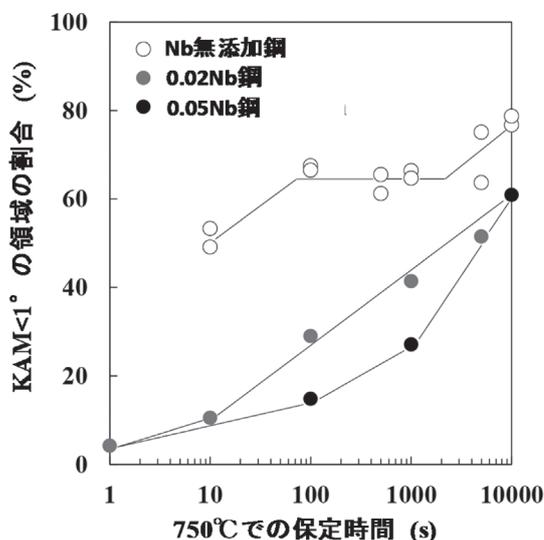


図6 750°C等温焼鈍時の α 再結晶(KAM<1°領域)の進行に及ぼすNb添加の影響²⁰⁾。

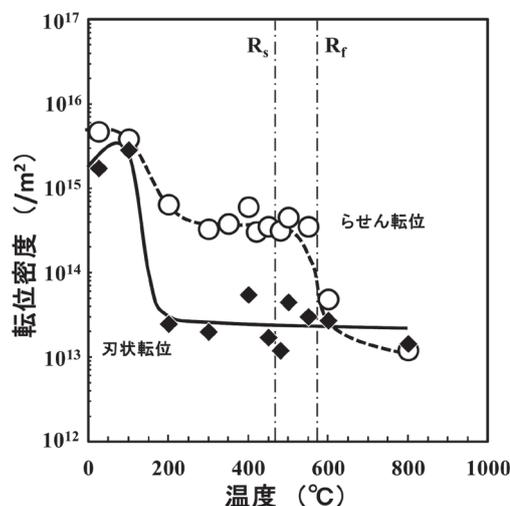


図7 Fe-0.3Si鋼の99.8%冷間圧延板の回復・再結晶焼鈍時の転位密度変化(X線ラインプロファイル解析)²²⁾。R_s:再結晶開始、R_t:再結晶完了

となった。TEM観察による転位組織の直接的評価の結果、サブグレインの形成および再結晶の開始は純Feでは速いことが確認された。したがって、Siの添加は、圧延時に転位が交差すべりをする頻度を低下させることに加え、回復・再結晶時において転位や原子空孔とSiとが相互作用し、上述したように回復やサブグレインの形成を抑制するものと推察されている。また、Alの影響はSiより小さいことも明らかとなった。このような固溶元素の影響については、3.3で述べる第一原理計算と融合させた新たな進展が、今後期待される。

3 先端計算材料科学を用いた加工・再結晶の研究例

3.1 結晶塑性解析による不均一加工組織の予測

多結晶体における塑性変形時の加工組織や集合組織の発達を予測することを目的に、従来から多くの試みがなされてきた。しかし、これらは、隣接する結晶粒や硬質第二相の存在による三次元的な変形拘束の影響、あるいは固溶元素によるすべり挙動への影響などを受けるため、解析は容易ではない。最近では、結晶塑性 (CP: Crystal Plasticity) -FEM (Finite Element Method)²³⁾ や CP-FFT (Fast Fourier Transform)²⁴⁾ などの手法が変形の予測に活用されている。特に後者は、計算が非常に効率的となる特徴がある。

低炭素鋼における多結晶 γ 相の圧縮変形シミュレーションをCP-FFTで行ったYamanaka²⁵⁾による研究例を紹介する。代表体積要素の大きさは $12.8 \times 12.8 \times 12.8 \mu\text{m}^3$ であり、結晶方位がランダムな結晶粒数200からなる三次元的な初期 γ 組織をPF (Phase Field) 法により先ず作成した。図8は、公称歪0.2まで平面歪圧縮変形した後の蓄積エネルギー分布 (図8 (a)) と結晶方位差分布 (図8 (b)) である。図8 (a) において矢印A~Cで示したように、特定の粒界近傍で蓄積エネル

ギーが局所的に高いことが明らかである。また、図8 (b) に示したように結晶粒内でも大きな結晶方位差を示す場所が得られている。三次元不均一加工組織の予測という点において重要な結果であり、多くの応用が期待される。一方では、すべり変形の高精度化、大歪変形への展開や実験による計算結果の検証が今後必要と思われる。特に、加工組織の不均一性をサブミクロンオーダーの空間分解能で非破壊的に実験的に検証することは容易ではないが、ペンシルビームX線を用いた3DXRDによる局所領域の転位密度や結晶方位解析に期待したい^{26,27)}。

3.2 加工と再結晶・相変態との連成解析

不均一加工組織は、再結晶や相変態の核生成サイトとして重要な役割を果たすので、計算で予測された不均一加工組織をベースに再結晶や相変態モデルと連成させた、一貫での組織や集合組織の発達を予測する試みがなされている^{23,25,28,29)}。また、三次元解析が一貫プロセスにおける連成解析においても可能となっていることは特筆される²⁵⁾。

例えば、Takakiら²⁸⁾は、fcc金属の静的再結晶についてCP-FEMとPF法とを連成させた二次元モデルを報告している。Yamanakaら^{25,29)}も、低炭素鋼の熱間圧延時における γ の加工に関するCP-FFTモデルと加工 γ からの α 変態に関するPFモデルとを連成させた組織予測モデルを報告している。PF法における核生成の扱いには自由度があり、上記の両研究においては核生成が一定の蓄積エネルギーを越えたところで優先的に生じる、言い換えると核を置くことを仮定している。一方、諏訪ら³⁰⁾は、一次再結晶の核生成はサブグレインの異常粒成長であると仮定し、90%冷間圧延した純FeのEBSDデータを初期組織としてサブグレインを構築し、サブグレインの異常粒成長から観た一次再結晶のPFシミュレーションを行った (図9)。実験との比較検討も行い、核生成・

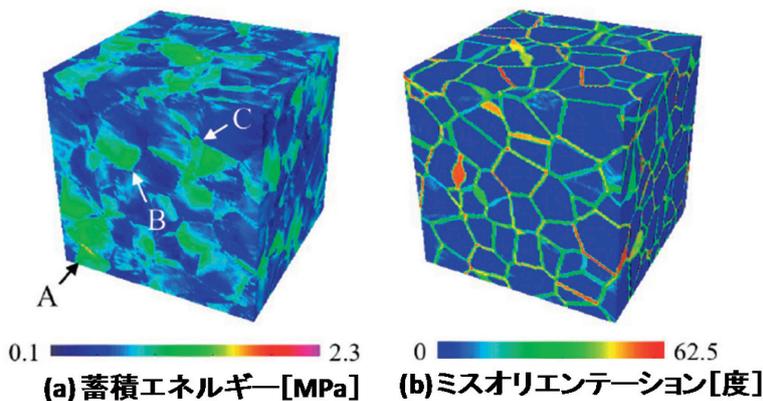


図8 低炭素鋼を γ 域で公称歪0.2まで平面歪圧縮加工した後の (a) 蓄積エネルギーと (b) ミスオリエンテーションの3次元分布²⁵⁾。

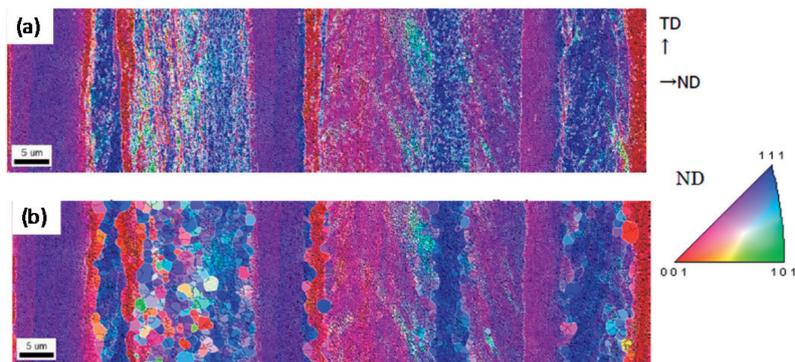


図9 (a) 純Fe 90%冷間圧延ま材のEBSDデータ(0.05 μmピッチ)から構築したサブグレイン組織および(b) PF法でシミュレートした再結晶初期段階の組織³⁰⁾。結晶方位はND方位を色づけ

成長型の再結晶機構やND//<111>再結晶集合組織の発達に関しても実験結果を定性的に再現することを確認している³⁰⁾。今後は、解析精度の向上が必要であり、例えば粒界エネルギーや界面移動度の粒界性格依存性に関する信頼できるデータベースは重要な課題の一つである。また、相変態のシミュレーションにおいては、 γ から α への変態時のバリエーション選択則が重要な役割を演じると考えられる。バリエーション選択則に関しては、例えばFuruharaら³¹⁾によるベイナイト変態時のいくつかのルールが既に提案されている。また、最近では、 α 変態における二重KS (Kurdjumov-Sachs) 関係の充足率におよぼす α エンブリオの配置や γ 集合組織の影響が検討されている³²⁾。今後は、バリエーション選択に関してさらに理解が深まり、変態組織や変態集合組織の予測精度が向上することが期待される。凝固も含めた一貫プロセスにおける冶金現象の連成解析は、将来研究の一つの方向と考える。

3.3 転位と溶質元素との相互作用に関する第一原理計算・分子動力学

不均一加工組織の発達を理解する上では、変形初期の転位のすべり運動に及ぼす溶質元素の影響に加えて、加工量が増加した時の転位の集団運動に及ぼす溶質元素の影響を理解することはきわめて重要である。

Wakedaら³³⁾は、第一原理計算を用いて、降伏強度を支配するbcc-Feのらせん転位の転位芯と種々の置換型固溶原子との相互作用について原子オーダーのスケールで系統的に検討した。その結果、1) 多くの固溶元素はらせん転位の芯と引力の相互作用を持つ、2) いくつかの元素(Si, P, Cu)はらせん転位の運動に対するPeierlsポテンシャルを低下させることを明らかとした。さらに、3) その起源が転位のすべりに対する固溶元素による電子論的効果(化学的ミスフィット)と関係することを明らかとした。

転位芯と溶質元素との相互作用は、変形初期の転位のすべり運動のみならず、その後の変形における転位間相互作用や加工硬化を伴う転位の集団運動、およびそれに続く塑性不安定現象と深く関係すると考えられ、原子オーダーからμm、mmおよびmオーダーまでのスケールを対象としたマルチスケール解析の今後の展開に期待したい。

4 将来展望

筆者は、企業研究者として39年前に鉄鋼材料研究をスタートした。動的ひずみ時効条件の下でFe-0.01N合金を圧延するときわめて明瞭なせん断帯が特定の結晶粒内に形成され、Goss方位を持つ再結晶粒が優先的に核生成する現象に遭遇し、感動した覚えがある。先端解析技術の最近の進歩は著しく、従来見えなかった現象をつぶさに観察することが可能となりつつある。また、計算材料科学の進歩により、従来では計算できなかった詳細な解析やマルチスケールでのアプローチも可能となりつつある。

しかしながら、以下に代表されるような課題も数多く残っているように思われる。第一に、加工組織の不均一性である。実験的にも理論的にもその理解と予測は不十分であり一層の高度化が求められる。第二に、加工・再結晶の方位選択性である。特に、回復現象(核生成)の機構解明とモデル化である。第三に、転位芯構造や交差すべりなどの一本の転位挙動に加え集団的な転位運動およびこれらに及ぼす添加元素の影響、さらには界面エネルギーや界面易動度と界面性格および添加元素の関係、などに関する基礎的課題である。今まさに、先端解析技術と計算材料科学が融合し、このような根源的な技術課題を解決し、材料の潜在能力を引き出す新たな飛躍が期待できる時代が到来したように感じる。

参考文献

- 1) 第219・220回西山記念技術講座「材料設計を先導する物理解析技術・計算科学」, 日本鉄鋼協会編, (2014)
- 2) 潮田浩作, 木村謙, 村上健一: 新版 鉄鋼材料と合金元素, 鉄鋼材料と合金元素編集委員会編集, 日本鉄鋼協会, (2015), 154.
- 3) 阿部光延, 小甲康二, 林征夫, 速水哲博: 日本金属学会誌, 44 (1980), 84.
- 4) G.Tsukamoto, T.Morikawa, K.Higashida, K.Kimura and K.Ushioda : ISIJ Int., 57 (2017), 1476.
- 5) 潮田浩作, 阿部光延: 鉄と鋼, 70 (1984), 96.
- 6) 中西冴, 森川龍哉, 東田賢二, 村上英邦, 木村謙, 潮田浩作: 鉄と鋼, 98 (2012), 253.
- 7) K.Murakami, M.Sugiyama and K.Ushioda : IOP Conf. Series : Mater. Sci. Eng., 89 (2015), 012009.
- 8) M.R.Barnett and J.J.Jonas : ISIJ Int., 37 (1997), 697.
- 9) K.Ushioda, S.Nakanishi, T.Morikawa, K.Higashida, Y.Suwa and K.Murakami : Mater. Sci. Forum, 753 (2013), 58.
- 10) J.L.Walter and E.F.Koch : Acta Metall., 11 (1963), 923.
- 11) M.Takenaka, Y.Shingaki, T.Imamura and Y.Hayakawa : IOP Conf.Series : Mater. Sci. Eng., 82 (2015), 012042.
- 12) K.Kimura, K.Ushioda, E.Ishimaru and A.Takahashi : Mater. Sci. Eng. A, 663 (2016), 86.
- 13) P.Moeckl, S.Rouvimov, I.Häusler, W.Neumann and S.Nicolopoulos : Ultramicroscopy, 128 (2013), 68.
- 14) G.Miyamoto, N.Takayama and T.Furuhara : Scr. Mater., 60 (2009), 1113.
- 15) M.Kubota, K.Ushioda, G.Miyamoto and T.Furuhara : Scr. Mater., 112 (2016), 92.
- 16) 久保田学, 小林由紀子, 潮田浩作, 高橋淳: 日本金属学会誌, 80 (2016), 620.
- 17) J.Takahashi, J.Haga, K.Kawakami and K.Ushioda : Ultramicroscopy, 159 (2015), 299.
- 18) 芳賀純, 澤田英明, 潮田浩作: 鉄と鋼, 103 (2017), 221.
- 19) T.Ogawa, N.Maruyama, N.Sugiura and N.Yoshinaga : ISIJ Int., 50 (2010), 469.
- 20) T.Ogawa, K.Sato, H.Dannoshita, K.Maruoka and K.Ushioda : ISIJ Int., 56 (2016), 2290.
- 21) T.Ungár, I.Dragomir, Á.Révész and A.Borbély : J. Appl. Cryst., 32 (1999), 992.
- 22) 富田美穂, 米村光治, 稲熊徹, 坂本広明, 潮田浩作: 鉄と鋼, 103 (2017), 149.
- 23) F.Roters, P.Eisenlohr, L.Hantcherli, D.D.Tjahjanto, T.R.Bieler and D.Raabe : Acta Mater., 58 (2010), 1152.
- 24) P.Eisenlohr, M.Diel, R.A.Lebensohn and F.Roberts : Int. J. Plasticity, 46 (2013), 37.
- 25) A.Yamanaka : Proc. Int. Conf. Solid-Solid Phase Transf. in Inorg. Mater. (PTM2015), ed. by M.Militzer, G.Botton, L-Q Chen, J.Howe, C.Sinclair and H.Zurob, TMS, (2015), 857.
- 26) S.Schmidt, S.F.Nielsen, C.Gundlach, L.Margulies, X.Huang and D.Juul Jensen : Science, 305 (2004), 229.
- 27) M.Kobayashi, T.Matsuyama, A.Kouno, H.Toda and H.Miura : Mater. Trans., 57 (2016), 2089.
- 28) T.Takaki, A.Yamanaka, Y.Higa and Y.Tomita : J. Computer-Aided Mater. Design, 14 (2007), 75.
- 29) A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita : ISIJ Int., 52 (2012), 659.
- 30) 諏訪嘉宏, 富田美穂, 田中泰明, 潮田浩作: CAMP-ISIJ, 28 (2015), 891.
- 31) T.Furuhara, H.Kawata, S.Morito, G.Miyamoto and T.Maki : Metall. Mater. Trans., 39A (2008), 1003.
- 32) 諏訪嘉宏, 杉浦夏子, 林宏太郎: CAMP-ISIJ, 30 (2017), 387.
- 33) M.Wakeda, T.Tsuru, M.Kohyama, T.Ozaki, H.Sawada, M.Itakura and S.Ogata : Acta Mater., 65 (2017), 445.

(2017年4月17日受付)