



## 計算科学特集刊行にあたって — 鉄鋼材料開発における計算科学への期待 —

フェロー 高橋 学

鉄鋼材料の開発は最終的に市場で利用されることが前提となることは言うまでもない。従って材料の“特性”を議論する場合には、材料がどの様に利用され、最終製品もしくはその一部を構成する部品としてどの様なパフォーマンスを示すことが期待されているかに注目することが重要である。

最終商品やその一部に対しては様々な特徴が要求されるが、その中で鉄鋼材料が持つ特性そのものが重要な役割を演じる場合には、鋼材に添加される各種元素の量を適正化すると同時に、マイクロ組織（各種変態組織や析出粒子の量、サイズおよびこれらの形状や硬さ、局所的な存在状態や結晶配向性等）を制御することによって、その要求に応えるべく、各種製造条件を調整・工夫する。このマイクロ組織の制御は一般に二つの方向から議論される。

第一は鉄鋼材料の特性（強度や変形特性、靱性や延性破壊特性等）がマイクロ組織によってどの様に変化し、特性向上に貢献するマイクロ組織がどの様なものかを特定するアプローチである。もう一方は、この様なマイクロ組織を達成するための製造プロセスがどうあるべきかの議論で、化学成分や加工・熱処理条件を制御して上述のマイクロ組織を所望の状態に制御するためのメタラジカルルート特定するアプローチである。これら二つの方向からのアプローチが同時に成立する場合に初めて、市場からの要求に応える鉄鋼材料の製造、供給が可能となる。

この様に、鉄鋼材料を利用する側の要求と、製造する側の技術を翻訳している機能の一つがマイクロ組織である。日本では2007年に近代製鉄発祥150周年を迎えたが、市場と製造技術の翻訳機能であるマイクロ組織の役割の理解と積極的な利用に関しては、今まさに新しい階層に進もうとしていると言える。マイクロ組織の役割は、例えば強度因子や変形特性を考慮した場合、各種変態組織の効果や析出強化に関する知見、またフェライト等のマイクロ組織単位が果たす役割等、広範囲な情報が蓄積されているにも関わらず、例

えば局所的な変形挙動とマクロな変形挙動が連続的に理解できているとは言い難い。このような真の翻訳機能の理解のためには、鉄鋼材料内部の二次元、更には三次元的な状態の把握、例えば変形中の局所的な変化を実験的に確認することが不可欠である。

しかしながら、全ての情報を実験的に把握することは必ずしも容易ではないと同時に、一般的に利用されている加工熱処理で達成できるマイクロ組織の二次元もしくは三次元構造は、材料に要求される特性を満足するに十分な構造でない場合も多く、実験的アプローチで翻訳機能の全ての理解と最適化を検討することは困難である。このようなアプローチに新たな自由度を与える技術が“計算科学”であり、今まさに実験的手法と相互補完しながら、翻訳機能である各種マイクロ組織因子の役割の明確化に貢献しつつある。

鉄鋼材料は上述の様にマイクロ組織を翻訳機能として、利用時の特性と製造時の制御技術が繋がっている。市場における鉄鋼材料の振る舞いの中で、例えば塑性変形が考慮される場合、局所的な変形挙動がどの様にマクロな変形挙動を支配しているかを理解することで、マイクロ組織の翻訳効果を積極的に利用し、材料の特性を向上させることが可能となる。ここでは、ミクروسケールでは決して均一でない鉄鋼材料の変形挙動を取り扱う必要があり、転位の移動集積や構造形成過程等も包含した局所的な変形挙動や応力、ひずみの集中、分配および、結果としての欠陥の生成と発展等を定量的に取り扱う必要がある。このような現象の理解の為に、有限要素法やフェーズフィールド法を用いた計算の適用が進んでおり、今後仮想的に変化させたマイクロ組織因子情報の中のどの因子がマクロな変形特性や破壊特性を支配しているかを評価することで、最適なマイクロ組織の構築にも貢献するものと考えられる。

一方、この様にして推奨されたマイクロ組織を実現する方法を構築する為にも計算科学が大きな貢献をすると期待される。鉄鋼材料製造工程では比較的短時間の間に鋼材に大きな温度変化を与えるため、必ずしも熱力学的な平衡状態が達成されるわけではない。従って熱力学に立脚しながらも、各種マイクロ組織形成過程に特徴を持った反応の動力学を高精度で理解することが必須となる。1950年代以降に精力的に研究されてきた相変態・析出の動力学研究は、均一場の中での固定形状界面反応を前提にしていることから、最終特性で要求されるマイクロ組織因子の一部しか表現することが出来ていない。マイクロ組織の複雑な形状や分散等の再現には上述のフェーズフィールド法も威力を発揮すると予想され、また、ブラックボックス化されてきた界面エネルギーの本質や各種元素、偏析等の影響については第一原理計算などのアプローチが定量的な議論を助けると考えられる。

また、これまで主に二次元反応で現象を記述してきたマイクロ組織形成予測技術に対して、三次元での反応を直接取り扱うことを可能にすることで、最終的な特性を支配する

マイクロ組織因子の再現や、より物理的な核生成・成長のモデル化も可能になると考えられる。このような定量的なマイクロ組織再現技術のためには、反応途中の鋼材の不均一性やその変化、核生成や成長における形状因子や競合反応の取り込みなど、今後の課題は残るものの、一旦体系化できれば、所望のマイクロ組織形成を可能とするメタラジカルルートを特定できるようになり、その中で実現性のあるプロセスを選択することで、過度なトライアンドエラーを実施することなしに市場から要求される鋼材の製造が可能になるものと考えられる。

この様に、計算科学の進展は、仮想的な鉄鋼材料製造工程を利用して三次元空間の中で結晶のサイズや種類、方向性や形状、更には固溶状態や析出粒子の分布等を計算機上で構築し、実使用環境でのパフォーマンスを評価しながら最適化する可能性も提供する。この時最も重要な事は、計算科学で表現している現象を実験的に確認する作業である。この点では、高エネルギービームを利用した直接測定やマイクロレベルの結晶方位解析、マイクロ組織の三次元観察、更には原子レベルでの構造解析技術等の物理解析技術の急激な進歩にも大きな期待をしたい。

3Dおよび時間変化も含めた4Dの実験・解析アプローチは日本鉄鋼協会のフォーラム等で国内でも積極的に推進されており、詳細なデータベースの構築や、海外の研究グループとの協業も進められている。また、計算科学分野においても日本鉄鋼協会での研究会等で現時点の技術、知見の集積が進められており、マイクロ組織認識と制御が二次元から三次元へ急速に展開されつつある。

以上の様に、マイクロな観察技術と計算科学は従来の鉄鋼材料開発を大きく変化させる可能性を持つ。この為に、より現実に近い現象表現方法の構築や新しい数学的表現や計算手法の導入、表現すべきマイクロ組織因子の特定等、要素技術の検討を継続的に推進することも重要である。市場と製造工程をマイクロ組織と言う翻訳機能で繋げる計算科学が新たな鉄鋼材料の理解と開発、改善に貢献することに期待したい。