

産学共創基礎基盤研究プログラム 令和元年度事後評価結果

1. 研究課題名：マイクロな内部応力の不均一分布形成機構の理解とその制御技術の確立

2. 研究代表者：中田 伸生（東京工業大学 物質理工学院 准教授）

3. 研究概要

パーライト変態内部応力、および不均一な内部応力が転位運動に及ぼす影響について、理論・実験・計算を融合した研究を進め、内部応力の不均一分布形成機構の解明と力学特性の制御を目指した研究を展開した。

研究期間の前半では、フェライト／セメンタイト間のミスフィットに起因した内部応力の発生、ミスフィット転位や構造レッジの導入ならびに鉄原子の界面拡散による内部応力の動的緩和機構、そして、内部応力の等方化を目的とするセメンタイトラメラの湾曲や分岐の解明等を実験的に行った。また、フェーズフィールド法による弾性ひずみエネルギー効果を考慮した相変態シミュレーション等、材料組織や内部応力形成に関する新たな計算・シミュレーション法を提案した。さらに、大型放射光・中性子施設での内部応力測定結果を適用して、モデルやシミュレーションの改善と最適化を図ってきた。

後半では、分子動力学法に基づいて、外部応力下におけるフェライト中の転位運動に及ぼす内部応力の効果を検証し、内部応力に立脚したパーライト鋼の強化機構モデルを提案した。さらに、変態温度や合金元素によって変化するフェライトとセメンタイトの格子定数によって内部応力を意図的に制御した力学特性向上の指導原理を提案した。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果

パーライト変態時にフェライト／セメンタイト間のミスフィットによって発生する内部応力とその動的緩和モデルの構築、EBSD や中性子による内部応力の測定手法の開発、フェーズフィールド法によるパーライト変態シミュレーション法の構築、および分子動力学シミュレーションによる引張変形中のパーライトの塑性変形や降伏現象と内部応力との関係の解明等のマイルストーンを、工夫を重ねて達成した。これらにより得られた多くの材料情報はモデル計算やシミュレーションにフィードバックされ、研究の進展に寄与している。本研究で生み出された計算法、シミュレーション法、獲得された材料情報は学術的に高く評価される。

研究実施にあたっては、産学共創の場での意見交換や本プログラム終了チームとの連携も意識して推進している。研究代表者のリーダーシップと異分野若手研究者間の有機的な連携により、研究活動が適切に進められ、順調に進捗し、期待通りの成果を得たと総括される。

4-2. 今後の研究に向けての期待

本研究で開発された、内部応力の発生と緩和の機構と内部応力の組織形成への影響に関するモデル化、計算法・シミュレーション法、および実験による内部応力の評価方法により、内部応力の役割が明らかとなり、その制御が重要であることが共通認識されるようになった。この点は、本研究の大きな功績と言える。今後に向けては、これらの成果の活用と更なる進展に期待がかかる。例えば、これまで無かった内部応力制御による力学特性向上法は、今後の材料高機能化に向けた重要なコンセプトであり、積極的な知的財産獲得に期待する。

研究展開への期待としては、実材料サイズ長さスケールでの特性評価・予測が可能なモデル化、計算法・シミュレーション法の構築がある。開発したモデル、計算法・シミュレーション法でミクロな性質や挙動を予測できるようになったことは大きな成果であるが、実際のマクロな材料では、ミクロのモデル計算では描ききれないスケール依存の不均一性がある。当研究チームでも今後の課題に挙げているミクロとマクロをつなぐ新たなモデル化、計算法・シミュレーション法の開発に期待している。

4-3. 総合評価

総合評価 A

鋼のパーライト変態時に発生する内部応力の発生機構と緩和機構を解明し微細構造の制御を介して、力学特性の向上を実現しようとする新機軸の挑戦的課題に取り組み、ほぼ計画通りに進捗した。

学術的には、パーライト変態にともなう内部応力（局所、マクロ）の存在を評価する実験方法をEBSD、中性子回折を用いて確立した点、およびパーライト変態の三次元シミュレーションとそれに内部応力の動的緩和機構を導入した基本モデルを構築した点、内部応力が力学的性質におよぼす影響に関する実験と理論モデルの構築をほぼ達成した点が特筆される。これらの成果は新規性があると同時に汎用性が高く、さらに、内部応力支配型の新たな組織・特性制御技術開発への道を切り拓いた意義も大きい。

このように、実験と計算を融合したアプローチにより、金属構造材料分野の大きな進展に貢献した。今後は、パーライト変態における温度や速度、および添加元素の影響等の内部応力を制御するための具体的な手法の検証に加え、ミクロとマクロを繋ぐ計算法・シミュレーション法の開拓、単独でサイズが大きい場合は脆いセメンタイトがパーライト中では塑性変形能を持つメカニズムの解明、マルテンサイトへの展開等、さらに研究を広く深く発展させることを期待する。オリジナリティの高い多くの基礎的知見を獲得しているの、論文執筆や内部応力制御を軸とする基本特許の出願にも期待したい。

以上