1 鋼材および溶接部の材質・強度予測*

梅 本 実**

Prediction of Mechanical Strength of Steels
and Welds*

by Minoru Umemoto**

キーワード：材料強度，組織，熱力学，変態，駆動力，結晶粒界，転位

1. は じ め に

溶接部を含め材料の強度を予測することは、材料設計や構造設計において非常に重要である。

材料の強度をその組織から予測する試みはこれまで多く行われた。それらは比較的簡単な多重回帰式によって、化学組成と組織因子から材質を予測しているケースが多い。日本鉄鋼協会特基研究会「変形の予測と制御」部会の「材質予測ワーキンググループ」で広い組成と組織範囲に渡って実施した引張試験のデータを重回帰分析して求めた各単一組織鋼（フェライト（F）、パーライト（P）、ベイナイト（B）、マルテンサイト（M））の機械的性質を表1¹⁻³⁾に示す。実測値との相関の例としてパーライトのYSの場合を図1に示すが、 R^2 （決定係数）は0.66で、現状では組織から重回帰式で予測される機械的性質の精度は満足できる状態にはない。

化学組成と組織から計算される機械的性質の精度が良くないのは、機械的性質に影響を与える組織因子の内容や影響の程度が十分に解明されていないからであろうか。ここで鉄鋼材料の機械的性質を組織から予測するにあたっての問題を以下の3つについて考えてみる。

1つ目は組織の測定精度についてである。表2¹⁻³⁾はフェライト・パーライト鋼の共通試料を使って鉄鋼メーカー6社で測定した機械的性質と組織の測定結果である。表2には降伏応力（YS）、引張強さ（TS）と破断伸び（T. EL）の機械的性質と、パーライト体積率（ f_p ）とフェライト粒径（ d_f ）の組織因子の平均値（A）と標準偏差（B）および標準偏差（B）／平均値（A）の値が示されている。B/Aの値を比較するとYS、TSでは2%と小さく、破断伸びでは少しばらつきが大きくなるものの5%以下である。一方組織のほうはパーライト体積率は試料そのものを使った場合が8.8%、写真を使った場合の方が多少ばらつきが小さくなるが、それでもB/Aは7.6%

と大きな値である。またフェライト粒径のばらつきはこれより大きく、試料から光学顕微鏡を使って測定した場合で15.8%、写真から測定した場合でも12.1%と大きい。組織の測定におけるばらつきは、機械的性質の測定におけるばらつきよりも大きいのである。パーライト体積率やフェライト粒径といった、鉄鋼材料の組織としては最も一般的で馴染みの深い組織の定量化において、測定者間でこのように大きなばらつきがあるという事実は、測定のばらつきの大きな組織のデータを使って予測される機械的性質の精度に限界があることを意味している。

次に組織の因子を純粋に取り出す事の困難さである。例としてフェライト相に対するMn元素添加の効果を考えてみる。Mnの添加により次のような現象が同時に起こることが予想される。(1) Mn元素の固溶による固溶強化、(2) Mn元素の粒径への偏析による粒界の性質の変化、(3) Mn元素とC元素との相互作用（ダンベルの形成）、(4) γ 粒径エネルギー、 γ 粒径、 α の核生成速度、 α/γ 界面の移動速度などの変化にともなう α 粒径の変化、(5) 固溶C量の変化、(6) セメントタイトの析出の変化などである。合金元素の添加という比較的簡単そうに思えるものでもその作用は多岐に渡り、1つの組織因子への影響として表現することに無理があるであろう。

3つ目の大きな問題として現実的な測定作業のしやすさの問題がある。機械的性質は測定のための労力をあまり要せずまた測定時間も短い。一方組織の方はその対称の大きさに逆比例して測定に長い時間を要する。このような事から組織の測定に長い時間を要するのであれば、引張試験をした方がよいという結論になる。組織が予測されるのであればよいが、組織を実測して機械的特性を予測するという考え方は成立しない。

以上、組織から材料強度を予測する場合の問題について考えてみた。その結果、特に組織の測定精度が機械的試験におけるばらつきよりもはるかに大きいことから、組織を基準にしているかぎり精度の高い機械的性質の予測は非常に困難であると考えられる。従って、精度の高い強度予測を行うためには、組織の測定を含まない材質

*原稿受付 平成8年7月30日

**正 員 豊橋技術科学大学 Member, Toyohashi University of Technology

表1 引張試験により求めた単一組織鋼の機械的性質の重回帰式
F: フェライト, P: パーライト, B: バイナイト, M: マルテンサイト.

	Mechanical properties YS (N/mm ²), TS (N/mm ²), U.El(%), T.El(%)
F	YS = - 9246C + 10600Cs + 44.2Si - 130P + 1592Nb + 1128d _F (μm) ^{-1/2} + 81.3 TS = - 5718C + 8836Cs + 74.6Si + 521P + 961Nb + 558d _F (μm) ^{-1/2} + 226 U.El = 1743C - 4141Cs + 0.340Si + 53.3P - 218Nb - 91.0d _F (μm) ^{-1/2} + 32.8 T.El = 2627C - 5382Cs - 4.50Si + 39.6P - 149Nb - 137d _F (μm) ^{-1/2} + 54.0
P	YS = 251S ₀ (μm) ^{-1/2} + 1730F ₀ - 257 TS = 201S ₀ (μm) ^{-1/2} + 3720F ₀ + 19.3 U.El = - 2.36S ₀ (μm) ^{-1/2} - 16.4F ₀ + 17.5 T.El = - 5.10S ₀ (μm) ^{-1/2} - 23.5F ₀ + 32.8
B	YS = - 0.0226T _γ (℃) - 1.90T _{tr} (℃) + 613C + 1.98Si + 15.8Mn - 113Nb + 308Ti + 149V + 1281 TS = - 0.172T _γ (℃) - 1.94T _{tr} (℃) + 929C + 61.1Si - 41.1Mn - 288Nb + 415Ti + 163V + 1668 U.El = - 2.16 × 10 ⁻³ T _γ (℃) + 0.0214T _{tr} (℃) - 2.02C + 0.945Si - 0.818Mn + 29.0Nb + 3.05Ti - 4.20V + 2.34 T.El = - 7.67 × 10 ⁻³ T _γ (℃) + 0.0455T _{tr} (℃) - 6.66C + 0.774Si - 0.995Mn + 58.5Nb - 22.8Ti - 14.5V + 7.50
M	YS = 1288C - 476Cs - 38.5Mn + 1.83Ni - 0.107d _γ (μm) - 16.9I + 937 TS = 1301C + 1089Cs - 38.2Mn + 3.90Ni - 0.124d _γ (μm) - 17.5I + 1008 U.El = - 3.10C + 21.4Cs + 1.36Mn + 0.188Ni - 1.65 × 10 ⁻³ d _γ (μm) + 0.318I + 0.0933 T.El = - 12.4C + 34.1Cs + 2.09Mn + 0.311Ni - 2.89 × 10 ⁻³ d _γ (μm) + 0.471I + 2.89

d : ferrite grain diameter, Cs : carbon in solution, S₀ : lamellar spacing, F₀ : cementite volume fraction,
T_γ : austenitization temperature, T_{tr} : transformation temperature, d_γ : prior austenite grain diameter,
I : tempering parameter, C, Si, P, Nb, Ti, V in wt%

図1 パーライト鋼の降伏応力のラメラ間隔による予測と実測値の比較.

予測の方法が検討されるべきである.

2. 組織の自由エネルギーと材料強度

組織と強度の関係で最も良く知られている Hall-Petch の関係^{4,5)} と Bailey-Hirsch⁶⁾ の関係について、エネルギーの立場から考えてみる。これらの関係は次式で表される。

$\sigma_y = \sigma_0 + k_g d^{1/2}$(1)

$\sigma_y = \sigma_0 + k_d \rho^{1/2}$(2)

ここで σ_y は降伏強度, σ_0 は結晶中を転位が動くときに受

表2 同一試料を使って鉄鋼メーカー6社により測定されたフェライト・パーライト鋼の機械的性質と組織の平均値 (A), 標準偏差 (B), とその比 B/A.

Ferrite・pearlite structure Fe - 0.25C - 0.04Si - 1.50Mn 1000℃×10min→650℃×30min			
	Average(A)	Standard deviation(B)	B / A (%)
YS N/mm ²	339	7.0	2.1
TS N/mm ²	532	9.0	1.7
T.El %	31.8	1.46	4.6
f _F % (spe.)	44.3	3.9	8.8
φ (photo.)	44.8	3.4	7.6
d _F μm (spe.)	12.0	1.9	15.8
φ (photo.)	11.6	1.4	12.1

ける摩擦力, d は結晶粒径, ρ は転位密度, そして k_g, k_d は定数である。エネルギーの立場から見ると、試料の単位体積中の粒界のエネルギーΔG_b は粒径 d に逆比例する。(1) 式のように d^{1/2} に比例することは ΔG_b^{1/2} に比例することになる。一方試料の単位体積中の転位の持つエネルギーは転位密度に比例するので、ρ^{1/2} に比例することは ΔG_{dis}^{1/2} に比例することになる。つまり Hall-Petch の関係も Bailey-Hirsch の関係もエネルギーの観点から見ると組織の持つエネルギーの平方根に比例することになる。従って両者を合わせて考えると次のように表せる。

$\sigma = \sigma_0 + K_1 \Delta G_g^{1/2}$(3)

$$\sigma = \sigma_0 + K_2 \Delta G_{dis}^{1/2} \quad (4)$$

次に係数の K_1 と K_2 の値について考えてみる。

まず K_1 は式(1)と(3)より

$$k_g = \{4\mu b \tau_g / (K\pi)\}^{1/2} \quad (5)$$

ここで μ は剛性率, b はバーガースベクトルの大きさである。 τ_g は粒界のバリアーとしての剪断強度であり, 理想剪断強度に等しいと仮定して $\tau_g = \mu / (2\pi)$ とする。 K は係数でらせん転位で1, 刃状転位の場合 $(1-\nu)$ である。ここで ν はポアソン比である。試料中のらせん転位と刃状転位の割合が50%ずつと仮定すると, $K = 1 - 0.5\nu$ となる。一方 ΔG_g は粒径 d との間に次の関係がある。

$$\Delta G_g = 4\sigma V / (\pi^{1/2} d) \quad (6)$$

ここで γ は粒界エネルギー, V はモル体積である。式(5)と(6)から

$$K_1 = \{\mu^2 b / (2\gamma V K \pi^{3/2})\}^{1/2} \quad (7)$$

(7) 式に鉄の物性値 ($\mu = 83\text{GPa}$, $b = 2.48 \times 10^{-10}$, $\nu = 0.28$, $\gamma = 0.6\text{J/m}^2$, $V = 7 \times 10^{-6}\text{m}^3$) を代入すると $K_1 = 2.1 \times 10^8$ となる。

次に K_2 は式(2)と(4)から

$$K_2 = k_d (\rho / \Delta G_{dis})^{1/2} \quad (8)$$

ここで $k_d = 2T/b$ であり, T は転位の線張力でほぼ $\mu b^2 / 2$ に等しい。試料1モル当たりの転位の持つエネルギーは

$$\Delta G_{dis} = V \rho T \quad (9)$$

ここで ρ は転位密度である。従って

$$K_2 = (2\mu / V)^{1/2} \quad (10)$$

鉄の物性値を代入すると $K_2 = 1.5 \times 10^8$ となる。 K_1 と K_2 の値を比較すると計算に種々の仮定を用いたことから考えて, 両者の値は極めて近いと言える。このことは変形に対する抵抗して, 粒界と転位を自由エネルギーから見た場合, 両者の抵抗能力はほとんど同じであることを意味している。そこで K_1 と K_2 の値が粒界と転位の場合で等しいとし, 平方根の中は両者の合計したものを使うことにする。このエネルギーを組織の自由エネルギーと呼ぶことにする。以上のことをまとめると, 材料の強度は組織の自由エネルギー ΔG_{st} の平方根に比例する。

$$\sigma = \sigma_0 + k \Delta G_{st}^{1/2} \quad (11)$$

ここで組織の自由エネルギーは粒界 (ΔG_b), 転位 (ΔG_{dis}), 弾性歪 (ΔG_{el}), 析出物 (ΔG_p) 等の合計したものである。

$$\Delta G_{st} = \Delta G_b + \Delta G_{dis} + \Delta G_{el} + \Delta G_p \quad (12)$$

3. 相変態の駆動力と組織の自由エネルギー

組織の自由エネルギーは, 組織の測定をしないでどのようにして求めることができるであろうか。鉄鋼材料などでは組織は相変態によって作られる。相変態の駆動力は変態後の組織と密接に関係している。その最もわかりやすい例がパーライトである。図2にパーライト変態に伴う自由エネルギーの変化を模式的に示す。過冷されたオーステナイト (γ) からフェライト (α) とセメンタイト (θ) が生成する場合の自由エネルギーの変化 (変態の

図2 パーライト変態の駆動自由エネルギー ΔG_{ch} とラメラ間隔 S_0 。

駆動自由エネルギー) は図中の ΔG_{ch} で与えられる。この ΔG_{ch} のエネルギーによりパーライトは成長し α/θ 界面が形成される。パーライトが有限の速度で成長する場合, ΔG_{ch} の一部が α/θ 界面エネルギーとなり, 残りは拡散過程で失われる。 ΔG_{ch} のうち α/θ 界面エネルギーになる割合は, 新宮⁷⁾によれば変態による自由エネルギー消費率極小の条件で決定される。これは Zener⁸⁾による成長速度最大の条件, Tiller⁹⁾による過冷量最小の条件と一致し, ΔG_{ch} の丁度 $1/2$ が α/θ 界面エネルギーとなる。従ってパーライトの界面エネルギーを単位面積当たり σ とするとパーライトのラメラ間隔 S_0 は変態の駆動力 ΔG_{ch} , モル体積 V_m を使って(7)式のように求められる。

$$S_0 = (4\sigma V_m) / \Delta G_{ch} \quad (13)$$

以上のことは変態の駆動力が組織を決めるという極めて重要なことを示している。つまりパーライト変態においては変態の駆動自由エネルギーが与えられれば組織の自由エネルギーを定量的に予測できるのである。

以上の議論から材料の強度は相変態の駆動自由エネルギーの平方根に比例することが予想される。

$$\sigma = \sigma_0 + K_{ch} \Delta G_{ch}^{1/2} \quad (14)$$

従って相変態の駆動自由エネルギーが計算できれば強度が予想できる。このように熱力学を使って材料強度を予測する方法を材料強度熱力学と呼ぶことにする。

4. パーライトにおける変態駆動自由エネルギーと降伏強度

パーライトの変態駆動自由エネルギーを計算し, 実測

の降伏強度との比較を行った。変態駆動自由エネルギーの計算にあたっては Hillert-Staffanson の正則溶体モデルと Uhrenius により報告されている Fe-C-X3 元系の熱力学係数を利用した。図3は一例として Fe-0.58C-0.04Si-1.50Mn-0.029Al 合金について計算した変態駆動自由エネルギーの温度変化である。駆動自由エネルギーは過冷度とともに直線に近い関係で増加することがわかる。

図4は4つの共析鋼で変態温度を 550, 600, 650℃と変え等温パーライト変態した試料の降伏強度 (YS) を $\Delta G_{ch}^{1/2}$ に対してプロットしたものである。それぞれの鋼種でよい直線に乗っており、降伏強度が $\Delta G_{ch}^{1/2}$ と直線関係にあることがわかる。 $\Delta G_{ch}=0$ の y 軸の切片は、ラメ

図3 Fe-0.58C-0.04Si-1.50Mn-0.029Al 合金におけるパーライト変態の駆動自由エネルギーの温度変化。

PearliteのYS(MPa)の測定値

Sample	650℃	600℃	550℃
Fe-0.58C-0.04Si-1.50Mn (B03)	415	536	676
Fe-0.77C-0.04Si-1.51Mn (B04)	482	612	757
Fe-0.79C-0.04Si-1.03Mn (B10)	486	629	734
Fe-0.77C-0.04Si-0.75Mn (B11)	477	602	702

図4 4種類のパーライト鋼の降伏応力と ΔG_{ch} の関係、パーライト変態は 650, 600, 550℃の各温度で等温保持によりおこなった。

ラー間隔が無限大の場合のフェライトとセメンタイトの複合材料の強度に相当すると考えられ、その強度はパーライト中のセメンタイトの割合に依存する。従って式(14)の σ_0 はカーボン量の関数であると予想される。それらを考慮して実測の 67 ケのデータについてパーライトの降伏強度の回帰式を求めると式(15)が得られた。

$$\sigma = (29.1 + 172C) + 193\{\Delta G_{ch} \text{ (J/mol)}\}^{1/2} \dots\dots\dots (15)$$

この式を使って計算したパーライトの YS を実測値と比較したものが図5である。ほとんど全ての実測値が予測値の $\pm 10\%$ 以内に入っていることがわかる。67 点の全測

図5 パーライト鋼の降伏応力の実測値と ΔG_{ch} による予測値の比較。

材料強度熱力学

組織の実測による強度の推定

図6 材料強度の予測に対する材料強度熱力学による方法と組織観察を基礎にした従来法との比較。

定値に対する相関係数は0.902であり、図1に示した実測のラメラ間隔を使って降伏強度との関係を重回帰して求めた式の場合の決定係数の0.663と比較して非常に精度が高いことが分かる。

図6に材料強度熱力学による予測方法と組織を基本とした予測方法を比較して示した。材料強度熱力学の方法では化学組成と変態温度から熱力学プログラムを使ってコンピュータにより変態駆動力を計算することによって材料の強度を予想する。変態駆動力のうち組織の自由エネルギーとして残る割合は非可逆過程の熱力学による組織形成理論の発展によって、将来は理論的に求められることが期待される。これに対して、組織の実測による方法では実際に合金を作成して熱処理により組織を作り、組織を定量化して重回帰式を作ることになる。合金の作成、熱処理などの多くの手間を伴うだけでなく、組織の定量化には個人差が入る可能性がある。材料強度熱力学では計算機により熱力学の変態駆動自由エネルギーの計算を行うので、個人差が無く熟練を全く要しない点などからだけでも、組織を測定する方法よりもはるかに優れているといえる。さらに上で示したようにパーライト鋼のYSなどについては強度の予測精度においても従来法よりもはるかに優れている。

それではこの材料強度熱力学による強度予測がこれまでなぜ試みられなかったのだろうか、そして最近なぜ可能になったのであろうか。一つには固体を扱う熱力学モデルの進歩と熱力学の各種係数の測定データの蓄積があげられる。例えばここで使った正則溶体副格子モデル他に、擬化学モデル¹²⁾、セントラルアトムズモデル¹³⁾、クラスター変分法¹⁴⁾など固溶体の自由エネルギーや各成分元素の化学ポテンシャルなどを取り扱う固体熱力学モデルがここ20年の間に使用され始めた。さらにCALPHAD(計算状態図国際集会)に代表されるように、コンピュータを使って状態図を作成する一連の研究が世界的規模で展開されており、相互活量係数など計算に必要な諸量が幅広い合金系で、かなりの精度で求められ、それらがデータベースとして蓄積されてきていることがあげられる。二つ目としてはコンピュータの普及である。かなり高級な計算のできるコンピュータが低価格で供給されるようになったことから、変態の駆動力などが手軽に計算できるようになった。そして変態の駆動力と強度を比較できるようになったのである。一般の材料強度はモル単位以上の大きさの材料を対象としたマクロな性質である。転位の1本1本の動きから初めて、変形に寄与する $10^{12}/\text{m}^3$ 以上の数の転位の動きを計算できる程には現在のコンピュータの能力はすばらしくない。したがってしばらくマクロな性質を表現するに最適な熱力学が材料の強度を議論するのに最適であると考えられる。

5. ま と め

鉄鋼材料の機械的性質をその組織から予測する場合の

予測精度は一般に良くない。この主たる原因は組織の定量化の精度が不十分であるからである。このことは組織の定量化を伴わない材質予測の方法が必要であることを意味している。材料の組織の測定を伴わない強度予測の方法の一つとして著者は材料強度熱力学を提案した。これは材料の強度が組織の自由エネルギーの平方根に比例すると考えられること、および相変態を通して作製される材料における組織のエネルギーは相変態の駆動力とある一定の関係があるという2つの原則の上に立つ。この2つの原理から材料の強度は相変態の駆動力の平方根に比例するという関係が予想され、実際パーライト鋼でこのことが確かめられた。今後相変態の理論から変態によって形成される組織が今以上に精密に予測されるようになるであろう。特に非平衡熱力学を使った変態組織の理論が進めば、変態の駆動力や母相の状態から変態生成物に残る格子欠陥の種類と量が見積れ、これを基にした強度予測がより発展するものと期待される。

一方材質予測は組織と材質の関係を明らかにする方向でも進展するであろう。組織の定量化に対して画像処理装置とそのソフトの進展が期待される。また光学顕微鏡、SEM、TEM、高分解能TEM、トンネル電子顕微鏡、原子間力顕微鏡など組織をよりミクロに直接観察する手段が進歩し、原子レベルでの構造が明らかにされるであろう。これらを通して組織がより精密に定量化されることが期待される。またコンピュータを使った相変態のシミュレーションなどから、粒径の分布、第2相の混合状態を定量的に表す方法も進むであろう。これらを通じてより複雑な組織の定量化が可能となり、強度と組織の対応がより深く理解されると思われる。またこれらとは別のアプローチである電子論による強度予測の発展も期待される。

参 考 文 献

- 1) 変形特性の予測と制御 特基研究会「変形の予測と制御部会」(日本鉄鋼協会編), (1994).
- 2) 梅本 実: 鉄と鋼 81 (1995), P. 157
- 3) 第159・160回西山記念技術講座「新しい時代を創造する高性能厚板」(日本鉄鋼協会編), (1996) 19.
- 4) E. O. Hall: Proc. Phys. Soc. B64 (1951), p. 747.
- 5) N. J. Petch: J. Iron. Steel Inst. 174 (1953), p. 25.
- 6) J. E. Bailey and P. B. Hirsch: Phil. Mag., 5 (1960), p. 485.
- 7) 新宮秀夫, 大槻徹, 尾崎良平: 日本金属学会誌 37 (1973), p. 82.
- 8) C. Zener: Trans. AIME, 167 (1946), p. 550.
- 9) W. A. Tiller: Liquid Metals and Solidification, ASM (1958), p. 276.
- 10) M. Hillert and L. I. Staffanson: Acta Chem. Scand., 24 (1970), p. 3618.
- 11) B. Uhrenius and S. Frondell: Metal Science (1977), p. 73.
- 12) R. H. Fowler and E. A. Guggenheim: Proc. Roy. Soc., A174 (1940), p. 189.
- 13) E-H. Foo and C.H. P. Lupis: Acta Metall., 21 (1973), p. 1409.
- 14) R. Kikuchi: Phys. Rev., 81 (1951), p. 998.