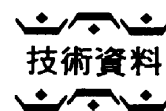


© 1983 ISIJ



合金設計の現状と将来

山崎道夫*

Present Status and Future Development of Alloy Design

Michio YAMAZAKI

1. はじめに

合金設計とは、合金中にどのような相がどのような割合で存在し、それらの組成がどうなっているか、形態はどうかということ、つまり金属組織を設計するのがその第1段と考えられる。ある希望の組織を得るために、我々は、100種類程度の元素から何をどのような割合で選ぶか（組成）ということと、それらにどのような加工ないし処理を与えるかという2つの手段を持っている。3次元的に各原子がどのように分布し、どのように結合しているかにより、材料の状態が完全に記述されることになるが、原子を一つ一つつまんで所定の位置にセットすることは特別な場合を除き不可能であり、ある程度マクロな加工と処理により組織を制御することになる。合金設計の第1段では、組成とマクロな処理・加工法の関数であるはずのマイクロ組織を推定する作業が必要となる（図1参照）。これは、マクロな手で非常に細かいマイクロな細工の仕上げを行うような困難さを有する。

金属組織を制御するのが我々の最終目標でないことは明らかで、次に、設計された金属組織を持つ（より正確には持つと予想される）合金がどのような特性を示すかということを実験しなければならぬ（図2参照）。これが金属組織の予想より更に困難な仕事であることは、材料試験ないし評価に関する実験的研究が世界的に、大々的に長期にわたって行われている一事からみても自明のことである。

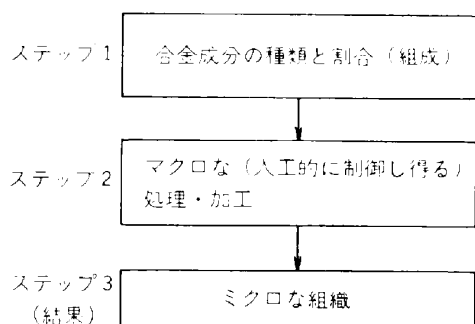


図1 合金設計の第1段（マイクロ組織の設計）

特性予想の困難さは、その基礎となる、合金設計によって予想されるマイクロ組織の不確かさの故に、更に助長される。そこで、図2のステップ2として、マイクロ組織の実測を入れ、組織が悪い合金について特性値の測定を省略することが考えられる。つまり、特性評価を実際に行うよりも、マイクロ組織の実測は容易である場合が多く、かつ、合金設計の第1段（図1）で、ある程度の精度で有望組織として選別が行われており、そのため組織の実測を行う回数がそう多くないことが、これ（図2のステップ2）を可能にする。また、組織の実測値から、特性値の推定をやり直して、特性値の測定を実行するかどうか再判断することも一つの有効な方法と考えられる。

特性の予想は、理想として定量的に行うよう努力すべきではあるが、定性的、つまり、A組織よりB組織の方がよい特性を与えるはずであるという程度でもかなりその効用を発揮する。実際問題として、設計された材料は使用前に多くのテストによる評価を受けるのであるから、特性値の絶対値はその段階で得られるわけである。合金設計で推定された特性値を、そのまま装置、機械の設計に用いることは、理想としてはあり得ても、現実的でない。

ここで、合金設計のむずかしさを更にはつきりさせる

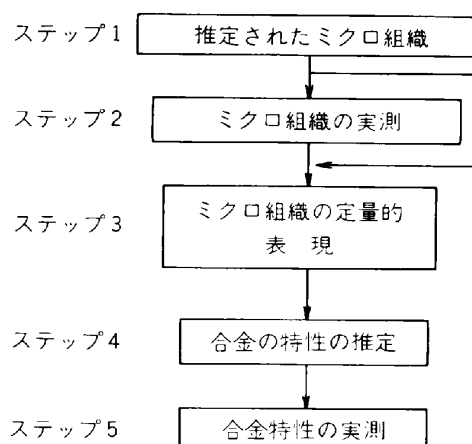


図2 合金設計第II段（特性の推定）

昭和57年5月25日受付（Received May 25, 1982）（依頼技術資料）

* 金属材料技術研究所 工博（National Research Institute for Metals, 2-3-12 Nakameguro Meguro-ku 153）

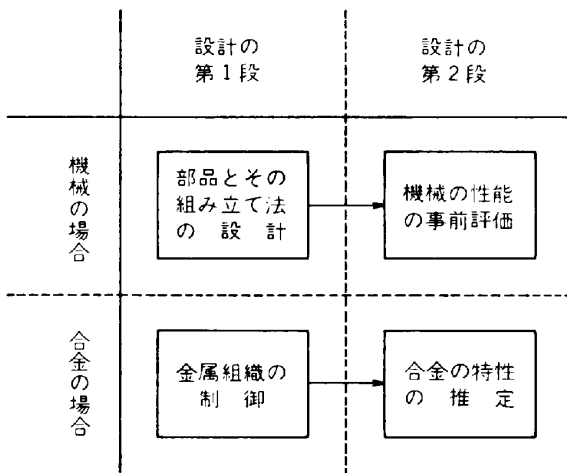


図 3 機械の設計と合金設計の対比. 設計は 2 段からなり, 機械設計の第 1 段 (部品図や組み立て図の作製) に当たるのが, 合金の組織設計であり, 機械設計の第 2 段 (性能の計算) に当たるのが合金の特性の推定である.

ため, 自動車などの機械装置の設計と合金の設計とを対比して考えておこう (図 3). 機械の設計では各種の部品の形状と大きさを定め, それらを立体的にどのような位置に配置して組み立てるかをほぼ完全に制御できる. この段階が合金の組織の設計に当たるわけであるが, 組織の設計がこれに比べていかに「靴を隔てて痒きを搔く」的なものであるかがわかる. 次に, 組み立てられた機械の性能 (例えば自動車の最高速度や燃費) は完全ではないにしても設計段階で定量的に予想し得る. これが合金設計の第 2 段の特性予想に対比し得るのであるが, 機械の場合, これがかなり容易に可能な理由は, 部品サイズが大でその形状や組み立ての位置をかなり自由に制御し得ることから来ている. 自動車等の部品に対応するものは合金の場合一つ一つの原子になる.

なお, 合金設計の場合, ミクロ組織の設計を行わず, 成分と処理・加工から直接特性を推定しようというアプローチも, 主として統計的手段のみを用いて, 可能であろうが, 合金設計を学問的に行い, 将来より完全な設計法の確立を目指すのであれば, 回り道のような道であろう.

以下, 三島ら¹⁾による, 各論型と通論型の合金設計という分類に従い, 実際にある程度成果の得られた合金設計 (各論型) の二三の例を概観し, それらの共通点や問題点を考え, 更に将来のより理想的な合金設計 (通論型) に結びつきそうないくつかの手段について検討する.

2. 合金設計の実例

2.1 高張力鋼の合金設計²⁾

日本鋼管 (株) では過去の多量のデータを蓄積し利用することにより高張力鋼の製品設計システムを開発した.

これは, 成分, 加工・処理法, 金属組織, 強度特性のデータを整理し, 組織 = f_1 (成分, 処理), 特性 = f_2 (組織) の関係から, 希望の特性とコストを成分と処理から求めるもので, 重回帰分析が重要な役割を果たしている. 例えば, 流れ応力 σ_f に対して,

$$\sigma_f = \sigma_0' + k_f \cdot d^{-1/2} + k_{f'} \cdot d_{SG}^{-n} + K_A \cdot f_A \dots\dots (1)$$

というモデル式を用いる. d は結晶粒度, d_{SG} はサブグレインサイズ, f_A はパーライトまたはペーナイトの分率 (軟質な地の中の硬い部分の分率) である. 資料²⁾ には詳細な説明はないが, 筆者の推定する合金設計の手順は次のようである. d, d_{SG}, f_A の実測値とそれに対応する σ_f の実測値の多数の組み合わせから, $\sigma_0', k_f, k_{f'}, n, K_A$ を重回帰手法で決定する. さらに, d, d_{SG}, f_A を鋼の組成と処理法の関数としてそれぞれ重回帰表示化する. 以上により, 鋼の組成と処理法から, d, d_{SG}, f_A が求められ, すでに定数として与えられている $\sigma_0', k_f, k_{f'}, n, K_A$ を用いて (1) 式から σ_f が得られることになる.

2.2 低合金鋼の焼入性の推定

KIRKALDY ら³⁾⁴⁾ は鋼の成分と結晶粒度から, 焼入れ硬さと焼入端からの距離の関係を表すジョミニー曲線を得る計算法を提案している. これは, 希望の焼入性を持ち, かつ, 例えば, 最も安価な組成の鋼を得るといような立場からみると合金設計になる. この方法では, まず, パーライトの成長速度 v を,

$$v = \alpha D (\Delta T)^2 \dots\dots\dots (2)$$

と表す. D は合金元素を含む場合の有効拡散係数ともいふべきものであり, また, ΔT は過冷度である. α は炭素鋼の実測 v を用いて定める. D は炭素のオーステナイト中の拡散係数 D_C を用いて,

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{D_C} + \sum (k_i c_i) / (D_i \Delta T) \dots\dots\dots (3)$$

と与えられる. c_i, D_i はフェライト安定化元素 i の濃度と粒界拡散係数で, k_i は定数である. ΔT を計算するための平衡変態温度は, 三元系 Fe-C-M についての実測値から相加的に求める. k_i は, 3 元系における v の実測値から定める.

次に, 潜伏時間, すなわち, TTT 図の変態開始曲線を求める. 二元合金から体拡散過程によつて単相が核生成する場合の潜伏時間 τ の理論式は, D_v を体拡散係数, σ を定数として,

$$\tau = \frac{\sigma T}{D_v (\Delta T)^2} \dots\dots\dots (4)$$

と与えられるので, 多元合金については,

$$\tau = \frac{\sigma T}{(\Delta T)^2} \cdot \frac{1}{D'} = \frac{\sigma T}{(\Delta T)^2} \left(\frac{1}{D_C} + \sum \frac{k_i c_i}{D_i \Delta T} \right) \dots\dots\dots (5)$$

と推定した. (5) 式で (3) 式をそのまま用いないで k を k' としたのは, k' を実験的に適当に定めることにより, 推定の誤差を小さくしようとしたためであろう. 定

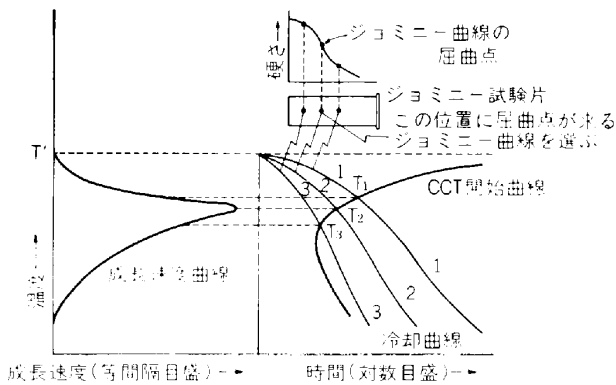


図4 ジョミニー曲線の屈曲点の求め方

数 σ , k_1' は Fe-C, Fe-C-M 合金について実測のデータ (τ の値) と一致するように定める. なお, τ の計算には結晶粒度の影響も考慮しなければならないはずであるが, 文献3)と4)には明確にされていない. 得られた TTT 曲線を Avrami の加算則により CCT 開始曲線に変換する.

さて, KIRKALDY は初め, ジョミニー曲線そのものを計算だけから求めようとしたが, 結果が思わしくなかつたので, 次のような便法を考案した. あらかじめ, 炭素量毎に, 一群のジョミニー曲線を求めておき, その中の一本を選ぶこととした. すなわち, 変態生成物の成長速度が最大になる温度 (図4の T_2) において CCT の変態開始曲線上の点を通過する冷却曲線 (曲線2) を求め, その冷却曲線に対応するジョミニー試験片の位置にジョミニー曲線の屈曲点を有するようなジョミニー曲線を選ぶこととした. この間の事情はやや複雑であり, 完全に説明すると長くなるが, KIRKALDY の仕事を詳細に紹介するのが本稿の目的でないので, 関心のある方は原論文³⁾⁴⁾を参照されたい.

2.3 γ' 析出型 Ni 基耐熱合金の設計

多くの Ni 基耐熱合金は, fcc 構造の γ 相 (Ni に各種元素が固溶) と規則化した fcc の γ' 相 (Ni_3Al をベースに各種の元素が固溶) の二相から成り立っている. 本系合金については過去に多量の研究結果の集積があり, それをふまえてかなり実用的な合金設計が行えるようになってきている. 以下, 筆者らが行った例⁵⁾⁶⁾の概要を記す (図5参照). まず γ' の組成を電算機の中で仮定する. γ' には各種の元素が, 元素固有の一定割合で固溶し得るが, それらの実測値を用いて, 各種元素が複合的に固溶した場合の複合的な固溶の程度 (固溶指数) が大きすぎるものを捨て, 次に γ' 中の Al 濃度がある実験式 (γ' 面……あらかじめ重回帰分析により求めておく) によつて計算することにより, γ と平衡するという条件を付与する. この γ' と平衡する γ 相の組成を計算するため, 各元素が γ' と γ とにどのような割合で分配するかという, 分配係数を γ' の組成の関数として求めておき (多数の実験結果の重回帰分析による), これ

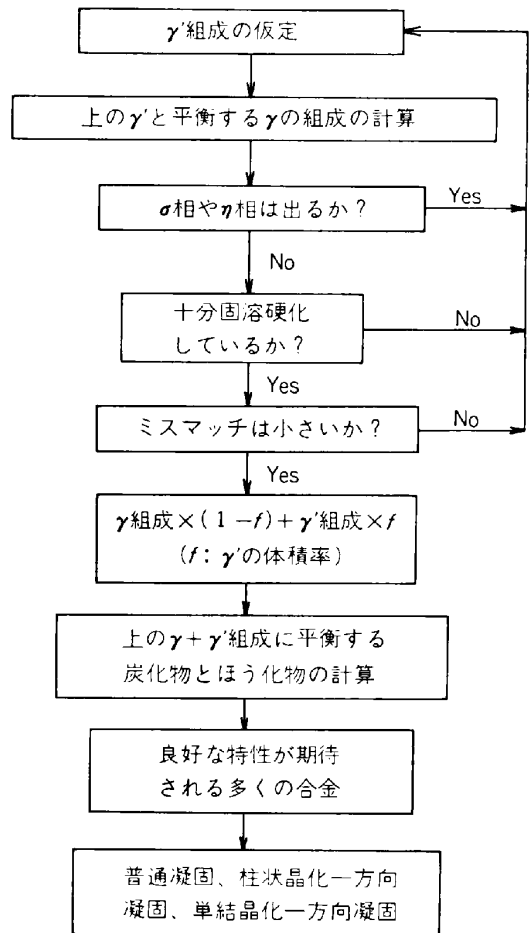


図5 Ni 基耐熱合金の合金設計の概略

を用いて, 設定された γ' 組成に対応する (平衡する) γ 相の組成を求める. この γ 組成に対して, PHACOMP という, σ 相生成の有無に関する, かなり完成された手法を用いて, σ 相を生成するものを捨てる.

以上の条件を満す γ と γ' の組成についてそれぞれの格子定数を計算し, 両格子定数の差 (ミスマッチ) の大きい組を捨てる. これは, γ と γ' の格子定数が同等であると, 両者の格子が整合状態になり, 強度的に好ましいことが知られているからである. このようにして計算された γ と γ' は互いに平衡しているのでその両相の量的割合は任意に設計することができる. この合金設計法では, 有望と考えられる, いくつもの γ - γ' の組が得られることになる.

3. 合金設計の現状

上記の3つの合金設計の実例についてその問題点, 共通点, 相異点などについて考えてみよう.

3例に共通している点は, 多量の実験データの蓄積を武器として, 理論と経験とを巧みに組み合わせている点であるが, どちらかと言えば後者に依存している割合が大であることである. なるべく理論ないし原理に裏打

ちされている方がよいことは当然であるが、理論が不完全だからと言って、あきらめずに、何らかの実際的な結果を得ようと努力したため、これらの実例に見られるような割合の理論と経験の組み合わせになつたものであろう。

理論と経験の組み合わせによる合金設計で好ましい一つのやり方として、理論式の係数を、実験データの当てはめにより定めるというやり方である。(1), (3)及び(5)式にその例が見られる。理論のみでは完全に定量的な関係を与えることが困難な場合が多く、未知の定数を含む形で式が与えられることが多いことから、このような処理法は今後もその例が多くなる。このような半理論式の利点は、完全な経験式(実験式)より、それを用いた外挿による予測の精度がよいと考えられることである。

2.3 節の Ni 基合金の設計において特筆すべきことは、合金設計上良好な合金と悪い合金とをかなり明確に区別できることである。つまり、この種の合金の特性と成分の関係は平坦な曲面になつておらず、山あり谷ありという感じであり、一見似たような組成でも、全くだめな合金と良い合金があり、合金設計のプログラムなしにこれを識別するのはかなり困難である。2.1 と 2.2 節の合金設計では、成分と特性との関係はかなり連続的な曲面上にあるように思われる。このような傾向の相異は合金設計手法にもかなりの相異をもたらすと考えられる。そのよつて来たる原因を一般的に論じるのはむずかしいが、Ni 基の合金の場合、多相合金であり、その相の量比や、相の平衡関係やマッチング関係、また他の異相の出現が合金の特性に大きく影響することが挙げられる。

4. より一般的な合金設計への努力

より一般的な合金設計を目指して努力が続けられている⁷⁾⁸⁾。将来の合金設計の完全な姿を画くことはむずかしいが、それを達成するために必要と考えられるいくつかの項目について、筆者の考え方を織りまぜながら述べてみよう。

4.1 金属物理学からのアプローチ

小川は、「金属物理学から見た合金設計」⁹⁾という解説で、合金設計への金属物理学からのアプローチを、金属結合の物理的立場及び化学的立場からの解釈において説明した。特に、小川は電気陰性度と電子空孔濃度の2つを同時に尺度として用いると金属間化合物の存在範囲が明確になるという WATSON と BENNETT の研究¹⁰⁾を、合金設計の立場から高く評価している。さらに、小川¹¹⁾は上記の解説を書いた後最近の2~3年の間に、金属物理と合金設計との関係から見て、かなり有望な進歩があつたとして、下記の2つの論文を挙げている。MORUZZI ら¹²⁾は原子番号を与えると、元素の凝集エネルギー、格子定数、圧縮弾性率を計算し得ることを示し

た。この手法は将来の合金設計に大きな夢を与えよう¹¹⁾。さらに、合金や化合物の特性が、第ゼロ近似で元の元素の特性に大きく左右されること(構造によるよりも)が経験的に知られていたが、HEINE¹³⁾はその経験則を Invariance Theorem として証明した。これが証明されたことで、合金設計にこの原理を応用する根拠が与えられたことになる¹⁴⁾。合金には構造敏感な性質も多いが、一方、Ni 基の合金について筆者らの研究室では、合金平均組成と熱膨張係数及び高温硫化腐食性が簡単な表現で結ばれることを見出しており、この原理の適用例になるのかもしれない。

金属物理学は合金設計にとって有力な武器であることは疑う余地がないが、銅がなぜ fcc 構造になるかという計算ができない現状⁹⁾では、合金には構造敏感な性質も多いことから考えて、金属物理学に全面的に立脚した合金設計はかなり将来のことになる。

4.2 状態図の熱力学的計算

金属物理学的なアプローチと必ずしも明確な境界はないが、最近状態図の熱力学的計算手法に関心が高まっている。CALPHAD (Calculation of Phase Diagram の略) というこの分野の専門誌が 1977 年から発行されている程である。しかし、当然ながら、状態図の計算が熱力学的原理のみから何の仮定もなしに行われるということとはあり得ない。状態図の計算は、各種の相の自由エネルギーが、温度と組成の関数として与えられることを条件としている。どの相が安定かという計算をするわけであるから、実際に安定に存在しない相の自由エネルギーや、存在し得る相についても安定に存在する範囲外の組成の自由エネルギーを知る必要がある。このようなデータがそろつて初めて系の自由エネルギーが最低になる場合、つまり、安定相の存在範囲が計算し得ることになる。

実際に存在する相の自由エネルギーは実測可能であろうが、これをすべての場合について測定したのでは、状態図を実験的に作るより更に多量の仕事が必要となる。

以上の理由により、状態図の熱力学的計算のためには、各種の相の自由エネルギーを温度と組成の関数として示す数学的表現が必要となるが、INDEN はこれを得る手法を2つに分類して解説している¹⁴⁾。第1は、パラメータを多く含む多項式近似による方法で、パラメータを適当に定めて実験データを内挿するようにする。しかし、この場合物理的モデルとの結びつきは限られた場合のみ可能である。また、内挿性は良いが、外挿性は悪い。第2の方法は、熱力学的諸関数に対する寄与を各種の基礎となる物理的效果に従つて分割するアプローチである。各物理的效果が物理的モデルによつて独立に取り扱い可能となる。

4.3 定量組織学

合金設計の基本的な流れは、前述のように「合金平均組成と処理条件」から「金属組織」を求め、この金属組織から「合金の特性」を求めることである(図1と2)。合金設計はなるべく定量的に行うべきであるから、金属組織も定量的に表現されている必要がある。近年定量組織学は発達の途上にありいくつかの解説がある¹⁵⁾¹⁶⁾。金属組織と、定量的に表される合金の特性値とを、統計的あるいは理論的に結びつけようと思えば、金属組織がデジタル表示で定量化されていなければならない。

ここで、金属組織とは一体何であろうかという根本問題を考えてみよう。合金の状態を表現する最も完全で、プリミティブな方法は各種の無数の原子のおのおの立体的地番を指定し、おのおの結合状態を記述することである。しかし、これは明らかに不可能で、その代わりに金属組織という概念が用いられるのであろう。合金中に、どのような①結晶構造(欠陥や非晶質も含めて)と②組成を持つた領域(相)が、どのような③量比でどのような④大きさ(広さ)で分散し、どのような⑤曲面で境を接しているか、⑥その界面、または⑦表面の構造はどのようなかを表現することが金属組織を表現することになる。

通常、定量組織学という概念には、各相の成分を規定することは含まれないようであるが、合金設計の立場からはそれも当然必要である[†]。また、上記の①～③の平衡状態のものについては、前節4.2の状態図的アプローチから予想可能のものであるが、非平衡状態の組織も多い。

上記④と⑤、すなわち、相の粒の大きさ(広さ)と分散及びそれらの境界の曲面形状は、定量組織学で「きめ」と呼ばれるものを形成する。「きめ」とは「要素がある種の規則に従って配列されてできる繰り返しパターン」と定義されている¹⁶⁾。このパターンの繰り返しは、例えばタイルをはり付けた壁のように規則正しくはないが、ざりとて全く無秩序ではないというところに特徴がある。不規則性の中味として、形状が単純でないということと、その形状が繰り返されるたびに少しずつ異なる(ばらつき)という2種類がある。単純でないパターンを記号と数値で表現するのみでなく、そのばらつきの定量的な表現も必要であろう。

上で、原子1つ1つの位置を記述することが不可能だから、その代わりとして金属組織という概念が必要となつたと記したが、金属組織の内容を上記①～⑦に分類して更めて眺めてみると、「成分と処理」により決定され、それが「合金の特性」を定めるものは、全原子の立体的な位置でなく、むしろ、本質的に金属組織であるという印象が強くなる。

† 各相別の組成を分析する技術は状態分析と呼ばれるが、この分野だけでも多量の研究要素を含んでいる。

さて、定量組織学は、実測された組織を記号化・数値化しようと努力している段階であるが、合金設計の立場からは、「定量化された記号：数値から元の組織を再現する」時の精度の向上を目指す余り、金属物理的な原理から離れて、記号化や数値化が行われないことを希望する。

4.4 統計的手法の活用

4.4.1 重回帰分析

合金設計の理論を補うものとして、理論の助けを借りながら、経験ないし測定データの統計処理による合金設計が当分主流となろう。より具体的には、前述のように、理論式や半理論式には、理論的に与えられない係数が現れることが多く、この係数を実験データに合うように重回帰分析によつて決定する方法を活用すべきである。

上のような、理論と重回帰分析の組み合わせ、及び純粋な重回帰分析に共通して言えることであるが、得られた式を外挿して得られた合金の実験値と推定値がかなりずれた場合、その実験データを用いて、もう1回重回帰分析を行い、回帰式を修正する手法が有望である。新しい実験値が、どうしても回帰式に乗らない場合には、その新しい点は、統計的にあるいは原理的に他と同一の仲間として扱えない範囲のものだと判断できる。

重回帰に代表される統計的な手法が適用できる範囲を見定めるのに、上記のような試行錯誤的方法でなく、金属物理的ないし熱力学的な理論研究を行うべきであろう。すなわち、理論によりすべてを知ろうとせず、同一原理あるいは同一の主要構成相(複数)が存在するであろう成分ないし処理の大まかな範囲を理論的に推定できれば、それはかなり有力な武器になるであろう。同一原理、同一相より成る範囲の合金は、かなり単純な回帰式で表現でき、その範囲内では外挿もかなりよく合うことが考えられる。全く新規な組成範囲にあり、組織も未知の優れた合金はこのような方法では見出せないかもしれないが、これは別途考慮すべきものであろう。

4.4.2 主成分分析

大村¹⁷⁾は主成分分析を耐熱合金の設計に応用することを試みた。門間¹⁸⁾も、炭素鋼及びMo鋼の高温強さのデータに主成分分析を応用して解析している。オリジナルデータは、成分、引張データ、クリーブ破断データ、硬さ、粒度等29項目に及んでいる。主成分分析では、これらのうちどれかを従属変数として他の変数で回帰するのでなく、各項目の数値に適切な係数を乗じてから合成したいくつかのベクトルとして検討し、全現象が2～3個の合成ベクトル(主成分)でうまく説明されるように、ベクトルを定める。このように、数学的に寄与率が大きくなるように定まるいくつかの少数の主成分は、結果として、それぞれ短時間引張強さ、クリーブ強さ、及び延性等を総合的に代表すると解釈される。門間は合金

設計と主成分分析との関係について次のように述べている¹⁹⁾。主成分分析では、回帰分析のように一つの目的変数に注目するのではなく、データ行列全体の情報についてのロスをなるべく小さくするようにして少数の主成分に要約することにより、データ解釈の見通しをよくすることを目指している。現実の合金設計においては、例えば、高温強度、溶接性、耐食性と呼ばれるような総合特性値を最適化することが要求される。得られたデータに対して主成分分析を適用し、上記のような既知の概念に適合する総合特性値が得られれば、それを説明変数とする回帰分析一回帰主成分分析への拡張が有力な合金設計手法となろう。

4.4.3 データベース

データベースが、合金設計を特に統計的手法を用いて行う場合に有用であることは当然で、日本では、東大の三島と岩田らが永年にわたって合金設計のためのデータベースの構築とその利用研究を行つている。データベースというのはデータファイルと異なり、「種々の業務(またはユーザー)に利用できるように統合化された共用ファイル」と定義され、その構造に、(1)階層型(木型)、(2)ネットワーク型、(3)矩形型の3つのモデルがある²⁰⁾。矩形型モデルは関係型モデル(Relational Model)と呼ばれることが多く、合金用のデータベースとして最も有用なタイプと考えられる。ここでいう「関係」とは厳密な数学的定義によるもの²¹⁾であるが、関係データベースとは、簡単にいうと、記号で互に関係づけられた多数の単純な表としてデータが蓄積されるものである。このモデルの利点は、構造が単純であるが、厳密な数学的基礎の上に成り立っており、他のモデルと異なり、データ構造の改造や、他の種類のデータの追加を行いやすいことにあるようである。2箇所別々に作ったデータベースのドッキングも可能とのことである²²⁾。

データベースから整理して出力されるデータを人がマニュアルで利用することも有り得るが、当然データベースと合金設計のための各種のアルゴリズムを連結して使用することになろう。この際、データベースに新しいデータがある量追加されたら、自動的に、新しいデータを組み入れた合金設計を行い、よい結果が得られたら出力させることも考えられる。

5. 新しい加工法に適合した合金設計

合金設計という主として成分の決定のみが頭に浮かぶが、当然加工プロセスも大きな影響を有する。そのような認識は従来からあつたが、最近、それらを更に一歩進めて、ある加工プロセスに適合した合金を設計するという考え方が重要になつて来た。これは、比較的最近になつていくつもの特殊な加工プロセスが実用化ないし実用化研究されているためでもある。例えば、超耐熱合金の一方凝固による単結晶化、機械的合金化、RSR(Rapid

Solidification Rate)を応用した粉末冶金技術、HIPを応用した粉末冶金技術、超塑性加工等である。図1で、処理、加工のプロセスを合金設計の単なる第2ステップとしてそれが組織にどのような影響を与えるかという観点でなく、特殊な処理加工法を完全に活かす合金組成はどのようなものであるかという考えに立つて総合的な研究を行うべきものと考えられる。

例えば、超耐熱合金の柱状晶の一方凝固においては、凝固直後に柱状晶の結晶界面に割れを生じやすく、そのため合金の成分設計に大きな制約が加わるが、単結晶合金の成分設計ではその制限がなく、強力な合金が開発される可能性が大きい。

56年度から8年計画で始められた、工業技術院の次世代産業基盤技術研究開発制度の高性能結晶制御合金の研究も、このような、加工と組成との完全なる融合を目指すものと言えよう。

6. ま と め

合金設計を完全な形で(純理論的に)行うことはかなり遠い将来の夢として、大いに追求すべきことであるが、本稿では、近い将来、かなりの努力をすれば、実行可能であろうという範囲で合金設計について考えて来た。そのような観点から、以上の説明を箇条書きにすると次のようになる。

(1) 合金設計で我々が制御し得るのは、成分とマクロな処理加工法のみであることをまず銘記すべきである。

(2) 合金設計は、組織の推定と、特性の推定の2段階からなり、後者の方に困難が大きい。

(3) 推定組織を実測してから、特性推定をやり直したり、特性測定を行うかどうか検討することが効率的である。

(4) 理論式で、式の形はきまるが、定数の値までは理論的に決定できないという場合が多いと考えられ、このような場合、実測データとの対比で定数を決めるとよい。この際、統計的手法が有効である。

(5) 合金設計では、特性が定量的に予則できなくとも、相対的な順位が予則できれば大きな力になり得る。

(6) 金属物理学の最近の進歩はかなり著しく、合金設計に対して大きな寄与が期待できる。

(7) 平衡状態図の熱力学的計算法が進歩しつつあるが、多項式近似法と素過程を物理的に評価する方法が試みられている。

(8) 定量組織学も進歩しつつあるが、合金設計側としては、組織の推定及び組織からの合金特性の推定を理論的に行えるように、金属物理学に沿った(組織を単なるパターンとして扱わない)表記法を開発すべきである。また、状態分析技術も重要である。

(9) 重回帰分析の結果を外挿して、推定値と実験値

が合わない場合、その新しい実験値を入れて重回帰分析をやりなおすとよい。

(10) 統計的手法(重回帰分析等)を適用し、外挿できそうな、同一原理ないし組織が存在する範囲を、合金に関する理論で推定するという手法が、現実的な合金設計法の1つとして期待できる。

(11) 関係データベースの合金設計への応用に大きな期待が持たれる。データベースと合金設計アルゴリズムを連結しておき、データベースのデータが増加したら自動的に合金設計をやりなおすというシステムも考えられる。

(12) 新しい加工プロセスに適合した、新しい成分設計という考え方も重要である。

なお、本稿をまとめるに当たり、合金設計の困難さが、更めて認識され、遅々として筆が進まなかつた。何とか一般理念から脱却して、具体的な方途の策定に役立つような考察を行つたつもりであるが、筆者の力が足りず言わずもがなの記述が多くなつた。本稿をまとめるに当たり下記の方々にはいろいろとお世話いただいた。深く感謝申し上げる次第である。

東京大学工学部：岩田修一氏

金属材料技術研究所：小川恵一、門間義雄、中島宏興、富塚功の各氏。

文 献

- 1) 三島良績, 岩田修一: 合金設計の研究開発の経緯と展望, 日本金属学会秋期大会シンポジウム予稿集(1980年10月), p. 105
- 2) 小指軍夫: 日本金属学会宿題テーマ研究会「合金設計」資料(55年7月11日)
- 3) J. S. KIRKALDY: Metall. Trans., 4(1973), p. 2327
- 4) J. S. KIRKALDY, G. O. PAZIONIS, and S. E. FELDMAN: Proc. of the 16th International Heat Treatment Conf. (1976), p. 169
- 5) 原田広史, 山崎道夫: 鉄と鋼, 65(1979), p. 1059
- 6) 山崎道夫, 原田広史: 電気製鋼, 51(1980), p. 311
- 7) 岩田修一, 三島良績: 日本金属学会会報, 15(1976), p. 271
- 8) 岩田修一: 材料科学, 15(1978), p. 252
- 9) 小川恵一: 材料科学, 16(1979), p. 204
- 10) R. E. WATSON and L. H. BENNETT: Phys. Rev., B18(1978), p. 6439
- 11) 小川恵一: 私信
- 12) V. L. MORUZZI, J. F. JANAK, and A. R. WILLIAMS: Calculated Electronic Properties of Metals (1978) [Pergamon Press]
- 13) V. HEINE: Electronic Structure from the Point of View of the Local Atomic Environment, Solid State Physics, ed. by H. EHRENREICH, F. SEITZ, and D. TURNBUL, 35 (1980), p. 1 [Academic Press]
- 14) G. INDEN: Special Computational Techniques, Phase Stability in High Temperature Alloys (1981), p. 27 (Chapt. 2) [Applied Science Publisher]
- 15) 中田栄一: 熱処理, 20(1980) 1, p. 32
- 16) 中田栄一: 金属(臨時増刊号)(1980) 3月, p. 29
- 17) 大村泰三: 学振 123 委研究報告, 14(1974), p. 165
- 18) 門間義雄, 宮崎昭光, 永井秀雄, 森下 弘, 横井信: 鉄と鋼, 67(1981) 5, S 440
- 19) 門間義雄: 私信
- 20) 穂鷹良介: データベース要論(1978) [共立出版]
- 21) D. D. CHAMBERLIN: Computing Surveys, 8(1976), p. 43
- 22) 岩田修一: 私信