

古原 忠

東北大学金属材料研究所・教授

軽元素戦略に基づく鉄鋼材料のマルチスケール設計原理の創出

§ 1. 研究実施体制

(1)「古原」グループ

- ① 研究代表者: 古原 忠 (東北大学金属材料研究所、教授)
- ② 研究項目 「クラスタリング制御による鉄鋼材料の高強度化」
 - ・フェライト中のナノクラスター・析出物の構造の解明および力学特性の評価
 - ・窒化時のナノクラスタリング・析出のダイナミクス解明

(2)「大谷」グループ

- ① 主たる共同研究者: 大谷博司 (九州工業大学工学研究院、教授)
- ② 研究項目 「固溶体中のクラスタリングおよび粒界偏析の熱力学的検討」
 - ・クラスター展開による固溶体の自由エネルギーの評価
 - ・原子間相互作用を用いた三元系状態図の計算と相境界の実測
 - ・侵入型-置換型(i-s)原子クラスターの第一原理計算
 - ・粒界構造モデルの構築と偏析挙動の熱力学的検討

(3)「沼倉」グループ

- ① 主たる共同研究者: 沼倉 宏 (大阪府立大学大学院工学研究科、教授)
- ② 研究項目 「炭素・窒素と合金元素の相互作用エネルギーの評価」
 - ・炭素・窒素の固溶度と短距離拡散に及ぼす合金元素の影響(実験)
 - ・電子論(密度汎関数理論)に基づく理論的評価

(4)「津崎」グループ

- ① 主たる共同研究者: 津崎兼彰(物質・材料研究機構 元素戦略材料センター、センター長)
- ③ 研究項目「元素トラッピングによる鉄鋼材料の高靱性化」
 - ・ナノインデンテーション法による溶質原子クラスター・析出物と転位との相互作用の評価
 - ・粒界・界面での元素トラッピングによる高強度鋼の高靱性化

§ 2. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(3-1)に対応する)

本研究では、元素間相互作用および元素と格子欠陥の間の相互作用を、精緻な物性測定、最先端ナノ解析と第一原理等の計算材料科学の統合によって定量的に評価し、固溶/偏析・クラスター/析出の境界領域でのナノヘテロ構造と力学特性の関係の学理を解明するとともに、元素機能に基づいた可能な限りレアメタルフリーでの鉄鋼材料の高強度化、高延性・高靱性化の材料設計原理の確立を目指すものである。

本年度は、鉄二元系合金の固溶体における元素間相互作用および自由エネルギーに関して理論的、実験的評価のスタートアップを行うとともに、i-s 溶質原子クラスタリングによる強度変化および元素トラッピングによる靱性変化のそれぞれについてモデル合金を用いた検討を行った。

(1) 固溶体中のクラスタリングおよび粒界偏析の熱力学的検討(大谷グループ)

Fe 中の主要元素から構成される二元系各相の自由エネルギーを、熱力学的解析と第一原理計算-クラスター展開法-クラスター変分法を適用して評価し、各二元系状態図を計算するデータベースを作成した。また、i-s 原子間相互作用を電子論計算で精密に計算する手法の検討と計算プログラムのコーディングを初めて行い、第一原理計算-クラスター展開法-クラスター変分法のスキームにより i-s 原子間の相互作用エネルギーを評価することに成功し、Fe-N 二元系で計算された理論状態図は実験状態図と良く対応することがわかった。Fe-B 系の粒界偏析について、粒界エネルギーをアモルファス相ないしは液相の自由エネルギーを用いて記述し、平行接線則により解析した結果、実測の B の粒界偏析量と良い一致を示すことがわかった。

今後は、クラスター展開による固溶体の自由エネルギーの評価および三元系状態図の計算と相境界の実測、i-s 原子クラスターの第一原理計算、粒界構造モデルの構築と偏析挙動の熱力学的検討、を行う。

(2) 炭素・窒素と合金元素の相互作用エネルギーの評価(沼倉グループ)

実験研究については、計画通り、実験の出発点となる高純度試料を作製するための湿水素焼鈍装置を設計・製作し、同時に既設の浸炭・窒化装置を改良した。これら二項目に予想以上に費用がかかったため、強制振動型力学スペクトロメーターに低温測定の機能を加えることは順延した(現在進めている合金元素に関しては必須ではない)。作製する希薄合金の組成と熱処理条件を慎重に検討し、窒素の平衡固溶度と短距離拡散(スネーク緩和)におよぼす Mn の影響を調べた。スネーク緩和の実験からは、Mn の第一近接位置と第二近接位置が同程度に N 原子をトラップすることが強く示唆された。その場合、相互作用エネルギーは-0.1 から-0.2 eV と評価され、N の固溶度への Mn の影響も両サイトが同程度の寄与をしているとして求めた値(-0.15 eV)とよく一致した。前年度(採択前)から進めてきた N-Cr と C-Cr の相互作用に関する実験結果とあわせて詳しく解析・検討し、N-Cr の相互作用は N-Mn と同じく引力的で若干強いが、C-Cr の相互作用は著しく弱いことが明確になった。これは従来の常識(C-Cr の相互作用は N-Cr や N-Mn と同程度に引力的であると考えられていた)と対立する。その原因は、溶質原子クラスターの大きさによって見かけの

相互作用エネルギーが異なるためではないかという考えに至った。今後、実験によりこの仮説を検証する。

理論研究では、計画通り科学技術計算用計算機と電子論計算と解析のためのソフトウェアを購入して、理論計算を実施する環境を作り上げた。加えて、東北大学金属材料研究所の研究者との共同研究で計算科学センターのスーパーコンピュータも利用できることとなった。10月にポスドク研究員を採用し、両方の計算資源を活用して、まず α 鉄中の軽元素(B, C, N, O)の電子状態を系統的に計算し、i-s 相互作用を理解する基礎として侵入型(i)溶質原子の存在状態を明らかにすることを試みている。原子番号が一つずつ異なる複数の溶質原子の性質を比較することにより、CとNの類似点と相違点が見えつつある。特に、置換型固溶が侵入型固溶よりもわずかに安定と考えられているBとの比較が興味深い。

(3) クラスタリング制御による鉄鋼材料の高強度化(古原グループ)

マイクロアロイ元素(s = Ti, Nb, V)を添加した低合金鋼の試料作製後、V添加材において相変態・時効熱処理後のナノクラスター・炭化物析出によるマクロ組織と強度(硬度)変化の測定により元素添加量-熱処理-特性マップを作成し、導入した3次元アトムプローブ装置と制御・解析システムの立ち上げを完了した。また、フェライトの規則化を起こすTi、Al、二相分離を起こすV、Crを添加したFe-s二元合金を α 相域の実用窒化処理温度でプラズマ窒化し、表面硬度プロファイルの測定により窒化層の特性および生成するナノクラスター・析出物の構造と合金元素の関連を調べ、クラスタリングを起こすTi、V添加材でs-Nクラスタリングが起こり著しい硬化が見られること¹⁾、複合添加による硬化の促進が起こることを見いだした。

今後、他の元素を添加した鋼での組織と硬度マップの作成、V添加鋼におけるクラスタリング/析出挙動および他のユビキタス元素添加の硬化挙動への影響の検討、複合添加窒化鋼におけるクラスタリング・析出挙動の検討を行う。

(4) 元素トラッピングによる鉄鋼材料の高靱性化(津崎グループ)

自動車用実用鋼板として重要となる固溶Cの存在しないIF鋼と微量の固溶Cが存在する極低炭素鋼板について結晶方位を特定した上でのナノインデンテーション解析を行い、微量の固溶炭素によって転位の増殖挙動に対応するポップイン応力が大きく変化することを明らかにして、実用鋼板の力学応答解析における本研究手法の有効性を確認した⁵⁾。また、元素トラッピングについては、規格値の倍である0.05%のP量を含む鋼と高純度鋼について通常の焼き戻しマルテンサイト組織を創製してPによる粒界脆化によって靱性値が大きく低下すること⁸⁾、Bを含まないFe-C-s合金を作製して溶接熱処理再現処理を施しHAZ靱性を評価して、HAZ靱性とC量の関係の基礎データを取得するとともに、微量のB添加で靱性が飛躍的に増加すること、を見出した。

今後は、ポップイン応力に及ぼす炭素量の影響、粒界組織の制御によってPによる脆化の克服、炭素量を一定にした上でB量を系統的に変化させた時のHAZ組織とHAZ靱性に及ぼす影響、を検討する。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

● 論文詳細情報

1. 宮本吾郎、富尾悠索、末次祥太郎、古原忠、“窒化した鉄合金におけるナノ析出組織”、熱処理, 51 巻 3 号, 128-133, 2011
2. G. Miyamoto, R. Hori, B. Poorganji, T. Furuhashi, “Interphase precipitation of VC and resultant hardening in V-added medium carbon steels”, ISIJ International, vol. 51, No. 10, pp. 1733–1739, 2011 (DOI:10.2355/isijinternational.51.1733)
3. 千葉真、宮本吾郎、古原忠, “純鉄の浸窒焼き入れ組織”, 日本金属学会誌, 76 巻 4 号, pp. 256-264, 2012
4. T. Murakami, H. Hatano, G. Miyamoto and T. Furuhashi, ” Effects of ferrite growth rate on interphase boundary precipitation in V microalloyed steels”, ISIJ International, vol. 52, No. 4, pp. 616-625, 2012 (DOI:10.2355/isijinternational.52.616)
5. K. Sekido, T. Ohmura, L. Zhang, T. Hara and K. Tsuzaki, "The effect of interstitial carbon on the initiation of plastic deformation of steels", Materials Science & Engineering A, vol. 530, pp. 396-401, 2011 (DOI:10.1016/j.msea.2011.09.102)
6. K. Sekido, T. Ohmura, T. Sawaguchi, M. Koyama, H.W. Park and K. Tsuzaki, "Nanoindentation/atomic force microscopy analyses of ϵ -martensitic transformation and shape memory effect in Fe-28Mn-6Si-5Cr alloy", Scripta Materialia, vol.65 ,pp.942-945, 2011 (DOI: 10.1016/j.scriptamat.2011.08.010)
7. M. Jafari, Y. Kimura and K. Tsuzaki, "Enhanced upper shelf energy by ultrafine elongated grain structures in 1100MPa high strength steel", Materials Science & Engineering A, vol.532, pp. 420-429, 2012 (DOI:10.1016/j.msea.2011.11.007)
8. Meysam Jafari, Yuuji Kimura and Kaneaki Tsuzaki, "Role of Delamination Fracture for Enhanced Impact Toughness in 0.05 %P Doped High Strength Steel with Ultrafine Elongated Grain Structure”, Advanced Materials Research.,409, ,pp. 231-236 , 2012