

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 (東北大学多元物質科学研究所、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(物質・材料研究機構)」グループ

- ① 主たる共同研究者:津崎 兼彰 ((独)物質・材料研究機構 元素戦略材料センター、特命研究

員)

② 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

(5)「津崎(九州大学)」グループ

① 主たる共同研究者:津崎 兼彰(九州大学大学院工学研究院、教授)

② 研究項目「強度靱性におよぼす元素機能の転位論・材料力学的検討」

- ・ ポップイン現象についての転位増殖機構に基づく転位論的検討
- ・ 高靱性の破面観察結果に基づく材料力学的検討

§ 2. 研究実施の概要

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、昨年度に引き続き溶質原子として侵入型溶質元素 (i) および置換型溶質元素 (s) を含むFe-i-s3元系における熱力学および相互作用の検討を行うとともに、固溶元素/ナノ析出/クラスタリングによる高強度化、元素トラッピングによる靱性変化の検討を行った。

第一原理を応用した熱力学的検討では、侵入型固溶体に対するクラスター展開・変分法の計算コードを3元系合金に適用することに成功するとともに、クラスター展開で鉄鋼中の固溶型元素と侵入型元素の間に働く原子間相互作用エネルギーを導出した。今後さらにモデルを拡張して、計算精度の向上を図る。

実験的な炭素・窒素と合金元素の相互作用エネルギーの評価については、新たにC-MnおよびN-Siの相互作用を平衡固溶度と力学緩和測定によって調べ、C-Mn原子間の相互作用はN-Mnと同様に引力的であることを明らかにした。C-Mo間相互作用についてもC-Cr間と同様著しく弱いことを示唆する実験結果が得られた。今後検証実験も進めながら、C/N-V, C/N-Cr, C/N-Mn, C/N-Siに関する相互作用について結果を取りまとめる予定である。

ナノ析出/クラスタリングによる高強度化研究では、V 添加フェライト鋼での相界面析出組織の3次元アトムプローブ(3DAP)観察とナノインデンテーションを組み合わせた評価手法を確立し、炭化物が微細になるほど局所的硬度が増加することを明確にした。また、複合添加窒化鋼における硬化の促進が、複合金窒化物の生成による析出組織の微細化によるものであること、特に準安定クラスターを前駆現象として平衡窒化物の微細析出が起こることを初めて示した。今後実用ベースに近い炭素含有マルテンサイト鋼における複合窒化物析出による高硬度化の検討に展開予定である。

元素機能の理解による高靱性化研究では、Fe 合金の転位の増殖挙動と転位組織の発達を TEM その場変形解析により調べ、変形初期において転位密度が低い条件では、転位密度の上昇とともに流動応力が低下する現象の実測に成功した。また、P トラッピングについては、P 量を系統的に変化させた鋼を作成して微細伸長粒組織が有効に作用し十分な靱性が得られる添加量の範囲を明らかにした。B トラッピングについて溶接熱影響部 (HAZ) の組織観察および破壊靱性値の評価を行い、微量 B を添加した新耐候性鋼ではシャルピー衝撃値に加えて CTOD 破壊靱性値も高い値を示すこと、微量 B 添加によって脆性破面単位が微細化することが高靱性化の原因であることを明らかにした。今後は、ナノインデンテーション法を種々の Fe 合金に展開し、ポップイン現象のメカニズム解明と脆性延性遷移現象との関係を明らかにするとともに、偏析状態とデラミネーション破壊の関係の検討、大型溶解により試作製造した厚板鋼材の HAZ ボンド靱性の評価などを行う。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

論文詳細情報(国際)

1. Z.-Q. Liu, G. Miyamoto, Z. Yang, T. Furuhashi, “Direct measurement of carbon enrichment during austenite to ferrite transformation in hypoeutectoid Fe-2Mn-C alloys”, *Acta Mater.*, 61, pp. 3120–3129, 2013. (DOI: 10.1016/j.actamat.2013.02.003)
2. Y.-J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, “Effects of alpha/gamma orientation relationship on VC interphase precipitation in low carbon steels”, *Scripta Mater.*, 69, pp. 17–20, 2013. (DOI:10.1016/j.scriptamat.2013.03.020)
3. Z.-Q. Liu, G. Miyamoto, Z.-G. Yang, T. Furuhashi, “Excess carbon enrichment in austenite during intercritical annealing”, *Metall. Mater. Trans. A*, 44A, pp. 4872-4875, 2013. (DOI:10.1007/s11661-013-1973-7)
4. Y. Tomio, S. Kitsuya, G. Miyamoto, T. Furuhashi, K. Oishi, K. Hono, “Plasma Nitriding Behavior of Fe-C-M (M=Al, Cr, Mn, Si) Ternary Martensitic steels”, *Metall. Mater. Trans. A*, 45A, pp. 239-249, 2013. (DOI: 10.1007/s11661-013-1991-5)
5. Meysam Jafari, Kaneaki Tsuzaki, “Transition in fracture mode from ductile to intergranular and cleavage in 0.05%P doped high strength steel”, *Journal of Alloys and Compounds*, 577, Supplement 1, S636-S641, 2013. (<http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.02.019>).

6. M. Jafari, W.M. Garrison, K. Tsuzaki, “Effect of initial microstructure on impact toughness of 1200 MPa-class high strength steel with ultrafine elongated grain structure”, *Metall. Mater. Trans. A*, 42A, pp.647-653, 2013.
(DOI:10.1007/s11661-013-2045-8)

7. M. Jafari, Y. Kimura, K. Tsuzaki, “Toughening by the addition of phosphorus to a high-strength steel with ultrafine elongated grain structure”, *Phil. Mag. Lett.*, 93, pp. 109-115, 2013. (DOI:10.1080/09500839.2012.750766)

8. L. Zhang and T. Ohmura, “Plasticity initiation and evolution during nanoindentation of an iron–3% silicon single crystal”, *Phys. Rev. Lett.*, (in press).

(3-2) 知財出願

CREST 研究期間累積件数(国内1件)