

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(物質・材料研究機構 元素戦略材料センター、招聘研究員)

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 機械工学部門、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、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元系における固溶およびクラスタリング状態の理論および実験的評価を行うとともに、合金炭化物強化鋼の延性向上の試み、元素複合添加による窒化鋼の高硬度化、塑性変形を支配する転位運動の解明、元素トラッピングによる高靱性化の大型部材での検証などを行った。

(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)

第一原理を応用した熱力学的検討では、本研究グループで開発した侵入型固溶体に対するクラスター変分法の計算コードを用いてFe-Cr-C, Fe-V-C, Fe-Ti-C3元系における固溶体相と炭化物の熱力学的物性値を計算し、その結果を状態図計算法であるCALPHAD法に導入することによって、これらの理論値が実際の材料の組織を再現できるかを検証した。その結果両者は良い対応を示したことから、実測することが困難な熱力学物性値を電子論計算で補完することによって、より精度の高い状態図計算が可能になることが明らかになった。またクラスター展開法を用いて評価したクラスター有効相互作用を用いて、固溶体中での置換型元素と侵入型元素のクラスタリング挙動をモンテカルロ法により調査した。その結果、Fe-Ti-C3元系ではTiとC原子のクラスタリングが時効初期から観察されたが、Fe-Cr-C3元系ではいずれの温度でも明瞭な原子の集合は起こらなかった。

(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)

$\alpha$ 鉄中の炭素・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、C, Nの平衡固溶度に及ぼす合金元素V, Ni, Al, Pの影響を実験によって調べ、3p典型元素Al, Si, Pおよび3d遷移

元素 V, Cr, Mn, Ni との相互作用の指標であるワグナーの相互作用係数の値がほぼ求められた。相互作用係数に含まれる合金元素との大局的な相互作用の影響を理論計算を援用して推定し、材料特性において問題となる局所的な相互作用のエネルギーを求める方法を確立した。後者を C, N の拡散ジャンプへの合金元素の影響から独立して求め、また第一原理計算によっても評価し、妥当性を調べ、確かめるのが最後の課題である。Fe-Cr-N 合金の単結晶を用いた力学緩和実験によって、N-Cr および Cr-N-Cr 溶質原子複合体の幾何学的配置を決定した。また、CrN クラスタ（ナノスケールの GP ゾーンの析出物）の析出と再溶解現象をも捉え、準安定固溶限を決定できることを示した。

#### (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)

ナノ析出/クラスタリングによる高強度化研究では、高強度・高延性を両立させるために、ナノ炭化物の分布が延性に及ぼす影響を調査し、フェライト単相材ではナノ VC 粒子を均一分散させて高強度化しても、不均一な変形が集中しにくく局部伸びの低下が少ないことを明らかにした。さらに、フェライト/マルテンサイト二相材のフェライトをナノ VC 粒子で強化することで、フェライトとマルテンサイトの強度差が小さくなり、その結果として軟質なフェライトへの変形集中が抑制されて局部伸びが保たれるという重要な知見を得た。また、実用鋼に近い炭素添加複合添加材の窒化においても、これまでの炭素フリー合金と同様に強窒化形成元素の析出によって弱窒化物生成元素である Mn, Mo の析出が誘起されることを見出した。

#### (4) 元素トラッピングによる鉄鋼材料の高靱性化(NIMS 津崎グループ)

元素トラッピングによる鉄鋼材料の高靱性化研究では、前年度までに得られた局所力学解析の手法を応用し、変形機構の素過程と元素の関係について、IF 鋼のらせん転位支配型変形を TEM その場変形で解析し、転位の易動度が負荷応力の関数になるモデルに基づいて応力指数を求めることに成功し、その値が刃状転位の場合よりも顕著に小さいことを明確にした。応力指数が小さいことは、同じ易動度を得るために必要な負荷応力が大きいことを意味し、らせん転位の易動度が bcc 鉄の変形応力に強い影響を持つことを示す結果である。粒界での元素トラッピングについては、Mo フリー高強度鋼棒材の実現に向けて、P の偏析状態とデラミネーション破壊の関係を検討し、P の凝固偏析がデラミネーション発生と密接に関係していることを明らかにした。また、B トラッピングを活用した Ni フリー新耐候性鋼の実現に向けて、ton クラスの大型溶解により試作製造した厚板鋼材の HAZ ボンド靱性の評価を行い、試作製造した厚板鋼材においても優れた靱性を実証した。

#### (5) 強度靱性におよぼす元素機能の転位論・材料力学的検討(九大津崎グループ)

強度靱性におよぼす元素機能の転位論・材料力学的検討研究では、ポップイン現象のメカニズム解明に向けた検討を、脆性延性遷移現象との関係を含めて検討し、ポップイン現象が転位の生成・増殖過程に関する理解を深めた。また、NIMS・津崎グループが開発した Ni フリーの新耐候性鋼の実用化に重要となる母材厚板の破壊靱性の測定を行い、580MPa 高強度鋼として十分な靱性を有することを確認した。

また今年度の代表的な論文は以下の通りである.

- Naoya Kamikawa, Kensuke Sato, Goro Miyamoto, Mitsuhiro Murayama and Tadashi Furuhashi, “Stress-strain behavior of ferrite and bainite steels with nano-precipitation”, *Acta Mater.*, 83, pp. 383–396.  
(DOI:10.1016/j.actamat.2014.10.010)
- L. Zhang, N. Sekido and T. Ohmura, “Real time correlation between flow stress and dislocation density in steel during deformation”, *Mater. Sci. Eng., A611*, (2014) 188-193. DOI: 10.1016/j.msea.2014.05.073
- 大塚秀幸, V A Dinh, 大野隆央, 津崎兼彰, 土谷浩一, 佐原亮二, 北澤英明, 中村照美 : “BCC-Fe の軸比と磁気モーメントに及ぼす炭素の影響の第一原理計算”, *鉄と鋼*, Vol. 100, No.10, pp. 1329-1338, 2014, (DOI:10.2355/tetsutohagane.100.1329)