

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「元素戦略を基軸とする物質・材料の
革新的機能の創出」
研究課題「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」

研究終了報告書

研究期間 平成23年4月～平成28年3月

研究代表者：古原 忠
(東北大学金属材料研究所、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究は、最重要な構造用金属材料である低合金鋼における合金元素間の相互作用および力学特性を支配する格子欠陥と元素との相互作用を理論・実験の両面から系統的に評価すると共に、最先端ナノ解析と先進的加工熱処理を駆使して固溶／クラスタリング／析出領域でのナノヘテロ構造と力学特性の関係を解明することで、可能な限りレアメタルフリーでの鉄鋼材料の高強度化・高延靱性化の材料設計原理の確立を目指したものである。

高機能化の主たるターゲットの1つは、bccフェライト鉄において強化能が著しい軽元素／侵入型合金元素(i)である炭素、窒素と、炭窒化物生成傾向の強い置換型合金元素(s)が結合したナノメートルサイズの元素クラスター／析出物を利用したフェライト鋼の高強度化である。古原グループでは、フェライト相変態時の相界面で起こる合金炭化物のナノ析出挙動を高分解能透過電顕と3DAPを併用した最先端ナノ解析により解明し、津崎グループのナノインデンテーションを用いた局所領域の力学応答解析との連携によりナノ析出の微細分散化が高強度化に寄与することを見出した。析出駆動力の増大が炭化物析出の微細化の条件であることを合金設計および熱処理条件の両面から明確化するとともに、自動車用の複合組織鋼板の高強度化への応用も検討して、高延性化設計への道筋も見出している。さらに、同グループでは、表面硬化処理の代表的な1つである窒化処理において、合金元素の選択的複合添加により準安定な合金元素-窒素ナノクラスタリングを前駆段階として利用することが、安定窒化物の微細化と著しい表面硬化に大きく寄与することを明確に示した。沼倉グループにおいて高純度合金におけるi-s相互作用の精密評価法を、また大谷グループにおいて世界で初めて侵入型固溶体の熱力学の第一原理計算ベースでの評価法を確立して、それぞれ検討を行った結果、固溶体中での高次の合金クラスターの存在と、これらが安定な合金炭窒化物の生成に至る挙動が明らかになり、古原グループが見出した固溶体中のクラスタリング制御による高強度化原理の広範な応用の可能性が示唆された。

もう1つの高機能化のターゲットは、不純物や機能元素の粒界トラッピングによる低合金鋼の高靱性化設計である。津崎グループでは、独自開発した加工熱処理を通じて伸長超微細粒組織を作製し、粒界破壊形態の制御による脆化元素Pの無害化により、P低減やMo添加を必要としないスクラップ鋼利用に適した高強度-高靱性中炭素棒鋼を実現した。また、以前に開発された耐候性用途のAl-Si添加低合金厚鋼板に関してppmオーダーでの微量B添加による低炭素鋼溶接熱影響部の著しい高靱性化を達成し、高靱性化で必須と考えられてきたNiフリー化を達成している。特に後者については、大谷グループが開発した粒界偏析を取り扱う熱力学モデリングによる偏析傾向の検討、古原グループによるB偏析の3DAP解析などが、溶接熱影響部でのベイナイト組織微細化の原理の解明に貢献している。開発鋼は、NIMS/九大の両津崎グループの連携による大型部材等での評価でも優れた特性を示し、実用化に向けてさらに前進している。

本研究における元素機能の基礎的理解の進展とそれに基づく鉄鋼材料の設計原理の発見は、今後の鉄鋼材料のより先進的な高機能化設計に大きく影響するものと考えられる。鉄の固溶体に内在するナノレベルの不均一性の重要性は、本研究に取り組む中で推進した国際共同研究、国際会議開催や国内学会での研究会活動を通じた研究者コミュニティでの討論、鉄鋼会社を初めとする素材メーカー、機械／自動車などユーザーとの討論などを通じて理解が広まり、研究者コミュニティの育成および新たな研究活動の活性化につながっている。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 軽元素を含む鉄合金の自由エネルギーの第一原理計算による評価

Multi-sublattice クラスタ展開・変分法の計算コードを世界に先駆けて開発し、侵入型原子を含む溶体の自由エネルギーを評価する手段を初めて確立した。これにより、準安定領域を含む広い組成範囲にわたる自由エネルギーの正確な計算が可能になり、希少元素を豊富なユビキタス元素で代替する新しい材料設計指針提案の基礎を築くことができた。同手法の適用により、高温での鉄炭化物セメンタイトの非化学量論性による安定化、フェライト鉄における準安定 2 相分離の存在など、新たな知見を得た。[榎木勝徳, 大谷博司, ふえらむ, Vol.19, No.11, pp. 841-847, 2014.]

2. α 鉄中の i-s 溶質原子間相互作用の精密評価

高純度の Fe-s 希薄合金において数百 mol ppm の C あるいは N を合金炭窒化物の析出が起らない条件で添加する方法を確立することで、C, N の固溶限が小さいフェライト相で置換型溶質原子 s との 1 対 1 の相互作用エネルギーの精密評価が可能になった。フェライト鉄においては 3d 遷移元素と固溶 N との相互作用は融鉄やオーステナイト鉄の場合と同様に窒化物形成傾向とよく対応しているのに対し、C との相互作用はこれまでの常識とは異なり炭化物形成傾向とは必ずしも対応せず、希薄固溶体では Cr-C や V-C の原子間相互作用は予想よりかなり弱いことを明らかにした。また、Fe-Cr-N 固溶体などにおいては高次の s-i-s 溶質原子複合体が安定に存在することを示し、ナノクラスタの核形成に関する重要な知見を得た。[Numakura Hiroshi, "Solute-solute interaction in α iron: the status quo", Archives of Metallurgy and Materials, Vol. 60, Iss. 2 (掲載決定), 2015.]

3. フェライトにおける塑性変形機構の元素依存性の解明

ナノインデンテーション法で得られるポップイン現象解析より、フェライト鉄の塑性変形開始を支配する転位の増殖におよぼす固溶元素の影響を評価し、固溶 Si により塑性変形開始に際する転位増殖機能が低下することを実験的に見出し、Si 添加により脆化原因に関する重要な知見を得た。同様の実験を他の元素についても展開し、元素添加による靱性変化の本質を明らかにしている。また TEM その場変形手法を用いて、極低炭素フェライト鋼において流動応力の実測と転位密度の計測に成功し、塑性変形がらせん転位の運動によって支配されていることを直接示した。[L. Zhang, T. Ohmura, Phys. Rev. Lett., 112, 145504. 2014。L. Zhang, N. Sekido, T. Ohmura, Mater. Sci. Eng., A611, pp. 188-193, 2014.]

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

1. 微量 B を活用した HAZ ボンド脆化の克服によるユビキタス耐候性鋼の実現

ユビキタス元素で構成される Al-Si 鋼(Fe-0.16C-0.6Al-0.6Si-1.5Mn)は 1%Ni 耐候性鋼と同等以上の耐食性を示す上に結晶粒微細化で強度と靱性を向上させることができるためユビキタス耐候性高強度鋼として期待されていた。しかし、HAZ ボンド(溶接金属に隣接する HAZ 部)の靱性が低いという弱点のために実用化が見送られていた。本研究では B の高い粒界偏析能に注目してその ppm 程度の微量添加で HAZ 組織を制御することにより HAZ ボンド靱性が著しく向上することを明らかにした。この弱点克服は Ni フリーのユビキタス Al-Si 耐候性鋼の実現につながる成果であり、老朽化橋梁などの補修用厚板への適用検討を開始している。

2. 脆化元素であるPを独自の加工熱処理(テンプフォーミング)を駆使してデラミネーションという特異な破壊形態を示すフェライト超微細伸長粒組織中の粒界にトラップすることで、従来の許容量(0.03mass%P)を遙かに超える0.09mass%Pを添加しても十分な靱性が得られることを明らかにした。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見出すなど靱性向上メカニズムを明らかにし、Moフリー高強度鋼棒材の実現に向けて大きく前進した。さらに本成果は、粒界脆化元素であるPをデラミネーション破壊の促進に活用できるように結晶粒界組織を制御すると、P添加でむしろ衝撃吸収エネルギーが高まる場合があることを示したもので、不純物元素を製錬で除去するのではなく、積極的に活用する事例を示したものである。[Meysam Jafari, Yuuji Kimura, Kaneaki Tsuzaki, Philosophical Magazine Letters, Vol. 93, No. 2, pp. 109-115, 2013.]

3. 非平衡 i-s クラスターを利用した鉄鋼の飛躍的表面硬化の実現

Fe-M 二元フェライト合金の窒化処理時における合金窒化物の析出の前駆段階において非平衡な窒素-合金元素クラスターが生成することを見出した。これを踏まえて、本来粗大な窒化物のみが不均一に生成する合金にクラスター生成傾向の強い元素を微量複合添加することで窒化物分散の均一微細化を実現し、著しい表面硬化を達成した。クラスター生成を前駆とした安定合金窒化物の均一微細析出が硬化能の向上の原因であることを示すことで、低合金フェライトにおけるナノクラスター利用による高強度化の可能性を明確にした。[G. Miyamoto, S. Suetsugu, K. Shinbo, T. Furuhashi, Metallurgical Materials Transaction A, オンラインにて掲載: 03 September, 2015.]

§2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

①「東北大学 大谷」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
大谷 博司	東北大学・多元物質科学研究所	教授	H23.4~H28.3
徳永 辰也	九州工業大学・工学研究院	准教授	H23.4~H28.3
飯久保 智	九州工業大学・生命体工学研究科	准教授	H23.4~H28.3
井上 仁	九州工業大学・工学研究院 物質工学研究系	CREST 研究員	H24.4~H25.3
榎木 勝徳	東北大学・多元物質科学研究所	助教	H27.4~H28.3

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
- ✓ i-s 原子クラスター、炭窒化物の熱物性に関する第一原理計算と実験
- ✓ 粒界の熱力学モデル構築、粒界相モデルを用いた粒界偏析の計算

②「大阪府立大学 沼倉」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
沼倉 宏	大阪府立大学・工学研究科	教授	H23.4~H28.3
仲村 龍介	大阪府立大学・工学研究科	助教	H23.4~H28.3

SOUISSI Maaouia	大阪府立大学・工学研究科	ポスドク研究員	H23.10～H28.3
本田研二郎	大阪府立大学・工学研究科	M1-M2	H23.4～H25.3
平松 靖也	大阪府立大学・工学研究科	M1-M2	H24.4～H26.3
渡辺 裕介	大阪府立大学・工学研究科	M1-M2	H24.4～H26.3
赤田 愛	大阪府立大学・工学研究科	M1-M2	H25.4～H27.3
尾松 裕介	大阪府立大学・工学研究科	M2	H26.4～H27.3
松岡 厚志	大阪府立大学・工学研究科	M2	H26.4～H28.3

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」

- ✓ 実験: 合金元素が炭素・窒素の固溶度と短距離拡散に及ぼす影響から評価
- ✓ 理論: 電子論(密度汎関数理論)に基づく第一原理計算から評価

③「東北大学 古原」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
古原 忠	東北大学・金属材料研究所	教授	H23.4～H28.3
宮本 吾郎	東北大学・金属材料研究所	准教授	H23.4～H28.3
紙川 尚也	弘前大学・理工学研究科	准教授	H23.4～H28.3
佐藤充孝	東北大学・金属材料研究所	助教	H26.4～H28.3
新房 邦夫	東北大学・金属材料研究所	技術補佐員	H24.4～H28.3
成田文代	東北大学・金属材料研究所	技術補佐員	H25.4～H28.3
張 咏杰	東北大学・工学研究科	M1-D3	H23.10～H28.3
小林大介	東北大学・工学研究科	M1-D3	H24.4～H26.3
Elango Chandiran	東北大学・工学研究科	D2-D3	H27.4～H28.3
塚本直樹	東北大学・工学研究科	M2	H27.4～H28.3
建山恭寛	東北大学・工学研究科	M1-M2	H26.4～H28.3
陳 迎	東北大学・工学研究科・ 国際教育院	教授	H23.4～H28.3

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」

- ✓ フェライト中ナノクラスター・析出物の構造解明と力学特性評価
- ✓ 窒化時のナノクラスタリング・析出のダイナミクス解明

④「物質・材料研究機構」津崎グループ

氏名	所属	役職	参加時期
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	H23.4～H28.3
大村孝仁	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	副ユニット長	H23.4～H28.3
関戸信彰	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	主任研究員	H23.4～H28.3

木村勇次	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	主幹研究員	H24.4～H28.3
中村照美	物質・材料研究機構・中核部門 材料創製・加工ステーション	ステーション長	H23.4～H28.3
小林 覚	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	客員研究員	H23.4～H28.3
原 徹	物質・材料研究機構・ 表界面構造・物性ユニット	主幹研究員	H24.4～H28.3
邱 海	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	主幹研究員	H26.4～H28.3
大塚秀幸	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	主席研究員	H26.4～H28.3
目黒 奨	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	研究員	H26.4～H28.3
小川 一行	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	研究業務員	H27.8～H26.3
Min Xiaohua	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	NIMS ポスドク研 究員	H24.4～H25.9
Zhang Ling	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	NIMS ポスドク研 究員	H23.4～H26.9
仲川枝里	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	派遣	H27.4～H28.3
渡邊朝香	物質・材料研究機構・ 構造材料ユニット	派遣	H24.4～H27.3

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
- ✓ 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「九大 津崎」グループ

氏名	所属	役職	参加時期
津崎兼彰	九州大学・工学研究院	教授	H25.4～H28.3
東田賢二	九州大学・工学研究院	教授	H25.4～H28.3
田中將己	九州大学・工学研究院	准教授	H25.4～H28.3
野口博司	九州大学・工学研究院	教授	H25.4～H28.3
松永久生	九州大学・工学研究院	准教授	H25.4～H28.3
小山元道	九州大学・工学研究院	助教	H25.4～H28.3
福島良博	九州大学・工学研究院	助教	H25.4～H28.3
永島達也	九州大学・工学府	M2	H27.4～H28.3

研究項目 「強度靱性におよぼす元素機能の転位論・破壊力学的検討」

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について
(研究チーム外での連携や協働についてご記入ください。ライフ分野では臨床医等を含みます。)

1. 大谷グループは multi-sublattice クラスタ展開・変分法の開発において、研究開始当初からデルフト工科大学 Marcel Sluiter 准教授と密接な共同研究を行っており、沼倉グループの理論研究の展開についても、現在討議を重ねている。また、津崎グループは韓国延世大学の Young-Kook Lee 教授と γ 鉄中 i-s 相互作用に関する討議を継続的に行っている。CREST における国際連携研究促進の助成を受けて、平成 25 年度は 11 月に Sluiter 准教授を、平成 26 年度は平成 27 年 2 月に Lee 教授を、3 月に再び Sluiter 准教授を招聘し、研究ワークショップをチーム内で開催した。現在デルフト工科大学は、European Commission が支援する Horizon 2020 project について、“CRITICAL element substitution in single-phase alloys through large-scale CALCulations and experiments” (CRITICALC) というタイトルでプロジェクト提案を行っており、東北大(大谷、古原)、大阪府立大(沼倉)が、EU および米国の複数の機関と共に共同参画している。
2. 文部科学省 HPCI 戦略プログラムにおける計算材料科学戦略拠点 (CMRI) において、構造材料の元素戦略における実験・計算の連携に関する講演および討議を行っている。また、京都大学構造材料元素戦略研究拠点 (PI: 津崎、拠点教員: 古原、大谷) および他の構造用金属材料の大型研究プロジェクト (新学術研究「バルクナノメタル」「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学」) にも主要メンバーが参画し、オールジャパンでの構造材料の元素戦略研究の主要メンバーとして活動を行っている。
3. 各種学協会においてシンポジウム開催などを通じて、鉄鋼材料の元素機能解明／元素戦略に関する情報発信／啓蒙活動、産官学、国内外での研究者ネットワークの構築を積極的に行っている。
 - 日本鉄鋼協会:「鉄鋼における i-s 溶質原子間相互作用とナノクラスタ形成」フォーラム (座長: 沼倉、委員: 古原、大谷、津崎) 平成 22~26 年
 - 日本鉄鋼協会「鉄鋼中の軽元素の挙動と力学特性の基礎」フォーラム (座長: 沼倉、委員: 古原、大谷、他) 平成 26~28 年
 - 国際鉄鋼科学シンポジウム (ISSS) (第3回組織委員長: 沼倉、古原、第 4 回組織委員長: 津崎)
 - 米国材料・金属学会 (ASM-TMS): Phase Transformations Committee (委員: 古原)
 - 国際研究ネットワーク ALEMI (Alloying Effects on Migrating Interface) (主要メンバー: 古原)

§ 3 研究実施内容及び成果

3.1 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(東北大学 大谷グループ)

3.1.1 クラスタ展開による固溶体の自由エネルギーの評価

《研究実施内容及び成果》

本研究項目では、まず Fe-C, Fe-N 系のように侵入型合金元素を含む固溶体の自由エネルギーを正確に評価できる計算コードの開発が必要であった。そこでその手法としてクラスタ展開・変分法(CVM)を採用して、3元系以上の Fe 基合金へ適用することを目指した。この手法自体は方法論が確立されているが、従来は溶体中で原子が互いに置換固溶する場合の自由エネルギーの記述に用いられ、侵入型原子を含む溶体については計算手法が確立されていなかった。そこで本研究グループでは、JST より国際強化支援のご援助をいただき、オランダのデルフト工科大学の Sluiter 教授と共同研究を行い、結晶を複数の副格子に分割してクラスタ展開を行える計算コードを開発した。これにより侵入型固溶体や、より複雑な構造の炭化物や窒化物などの化合物の自由エネルギーの正確な評価が可能になった。そこで、第一原理計算により算出されたエネルギーを用いてクラスタ展開、クラスタ変分法を行い、固溶状態の自由エネルギーおよびその熱力学的性質について調べた。たとえば Fe-Cr-N3 元系を対象とした場合、 α -、 γ -Fe 中で Cr は置換型サイト、N は侵入型サイトを占めることから、熱力学モデルとして Fe と Cr の固溶、侵入型サイトでは N と空孔の固溶をそれぞれ分離する擬4元系モデルを考えた。計算では、置換型サイトと侵入型サイトにそれぞれの構成元素を配置した規則構造を、bcc モデルでは 246 種類、fcc モデルでは 899 種類作成し、VASP コードを用いて各構造のエネルギーを計算した。計算結果の例として、この手法で計算した Fe-Cr-N3 元系の 1000K における自由エネルギー曲面を図 1 に示した。この図で Cr:N=1:1 の点は fcc の CrN、すなわち B1 構造の CrN に相当するが、その自由エネルギーは大体 -20meV/atom 程度であり、これは Frisk らによる熱力学的解析の結果である -20kJ/mol におおむね一致している。Cr-N の線上で見ると、エネルギーが最も安定になるのは化学量論組成から Cr 寄りの点であり、N がやや少ない。

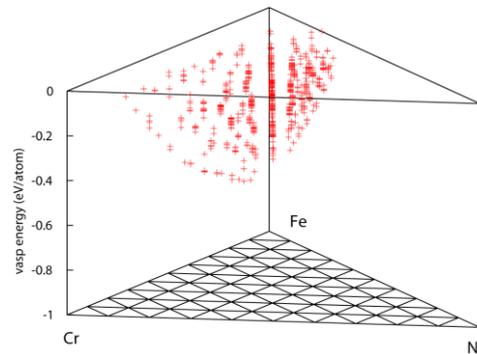


図 1. クラスタ展開・変分法による Fe-Cr-N3元系の 1000K における自由エネルギー曲面

3.1.2 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

《研究実施内容及び成果》

本研究で開発したクラスタ変分法の計算コードを用いて自由エネルギーを計算し、それを状態図の熱力学的解析手法に導入して状態図計算を行った。この計算コードは複雑な構造にも適用することができる。そこで空孔の存在を考慮したセメンタイト相の自由エネルギーをクラスタ変分法によって計算し、さらに同様に計算したフェライト(α 相)やオーステナイト(γ 相)の自由エネルギー、相境界や活量などの実験値も取り入れながら計算した Fe-C2元系状態図の計算結果について示す。Fe-C 系を構成する α 相、 γ 相に対しては、bcc 構造と fcc 構造の侵入型サイトである八面体型格子間位置に C 原子が配置するモデルを用いた。ただし α 相では、結晶学的に等価な 6 つの八面体型格子間位置すべてに C 原子を配置すると、高 C 領域で構造自体が不安定になり、クラスタ展開・変分法の計算が困難になることがわかった。そこで C 原子が入るサイトとして、そのうちの 3 つだけを占有することを仮定した。セメンタイトに対しては、C 濃度が Fe₃C の組成比より少ない場合は、セメンタイトにおける C 原子と空孔が置換するモデルを用いた。C 濃度が Fe₃C の組成比より大きい場合には、Fe で構成される八面体の中心位置にも C 原子と空孔が固溶するモデルを適用した。このようにして新たに評価した各相の自由エネルギーを用いて計算した Fe-C 2 元系状

状態図を図2に示した。本研究で評価したパラメータによれば、低温の α 相中では黒鉛が安定であるが、 γ 相ではセメンタイトが平衡相となっている。これはセメンタイトの侵入型位置における炭素原子と空孔の配置エントロピーの効果により、高温でこの相が黒鉛に対して安定化するためである。また、 α 相には準安定2相分離領域(点線)とスピノーダル領域(●)が存在することもわかる。

一方このような取り扱いを3元系侵入型固溶体にも適用し、固溶体の相境界の実測値との整合性を確認した。対象とした合金系は Fe-Cr-C、Fe-V-C、Fe-Ti-C 3元系状態図とした。ここでは Fe-Cr-C 3元系状態図についての結果を中心に結果を述べる。まずクラスター変分法を用いて、Fe-Cr-C 3元系の fcc 相とセメンタイト(Fe, Cr)₃C の自由エネルギーを準安定領域も含めて計算した。さらに(Fe, Cr)₇C₃と(Fe, Cr)₂₃C₆の準安定構成成分である Fe₇C₃と Fe₂₃C₆の生成自由エネルギーを、格子振動と調和近似による格子膨張の効果 considering して計算した。これらの計算結果と fcc 相に対する炭化物の固溶度などの相境界データを熱力学的に解析し、3元系状態図の計算を行った。本研究ではC原子が八面体格子間位置に配置する副格子モデルを用いたので、fcc 構造の Fe、Cr、CrC、FeC が基本構成成分であるが、このうち CrC、FeC は熱力学的に不安定であり、第一原理計算でもその安定性を正確に評価できない可能性があった。そこで炭化物の固溶度の実験結果から、これらの値を決定することにした。図3において、Fe側の固溶限の計算結果を実験値と比較した。(Fe, Cr)₇C₃と(Fe, Cr)₂₃C₆では、Fe₇C₃と Fe₂₃C₆の生成自由エネルギーは本研究で評価した結果を、Cr₇C₃と Cr₂₃C₆には既存の解析結果を適用した。このように計算結果と実験値はよく一致することから、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。

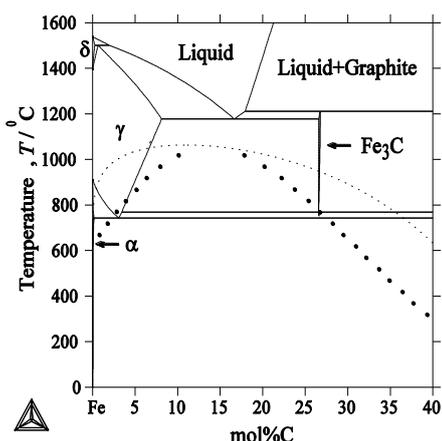


図2. セメンタイトの非化学量論性を考慮した Fe-C 2元系計算状態図

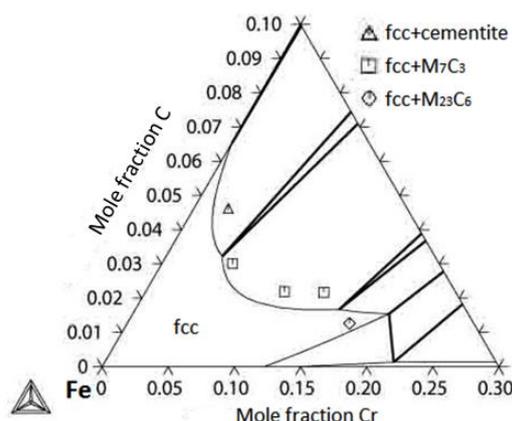


図3. Fe-Cr-C 3元系 T=1273K における平衡状態図と実測値の比較

3. 1. 3 i-s 原子クラスター、炭窒化物の熱物性に関する第一原理計算と実験

≪研究実施内容及び成果≫

i-s 原子間の多体相互作用エネルギーを抽出する手法について検討した。すなわち、沼倉グループでは、湿水素焼鈍装置および浸炭・窒化装置を用いて、C-X および N-X 間の相互作用を平衡固溶度とスヌーク緩和の測定によって調べ、従来の実験的知見と大きく異なる結果を見出している。その原因として、従来の研究報告の多くでは平衡化時間が長いために、置換型溶質原子と C 原子が複数集まった溶質原子クラスター(あるいは微細合金炭化物)が形成されていることを挙げている。そこで、解析手法として、本研究グループが開発したクラスター展開・変分法の計算コードを応用し、ここから計算される原子対の有効相互作用エネルギーを用いて熱力学的に定義される相互作用エネルギーと対比した。図4は Fe-Ti-C 系における二体クラスターに働く原子間相互作用エネルギーの原子間距離依存性の計算結果である。意外なことに fcc 中では i-s の最隣接ペアの相互作用は斥力であり、第二隣接ペアでは引力であるが、相互作用の絶対値も小さく、高温下で

は Ti 原子単独では侵入型元素のトラップサイトとしては機能しない可能性があることがわかった。bcc についても同様の傾向がみられる。また図 5 は Ti と C の二体間の相互作用を、四体までのクラスターで展開した場合と二体までのクラスターで展開した場合について示したものである。この結果から二体のクラスターだけを用いて展開した相互作用は実験値に近い値を示していることがわかった。したがって、実測された二体の相互作用は高次の多体クラスターの相互作用を二体に押し込めた結果であることが推定される。

3. 1. 4 粒界の熱力学モデル構築、粒界相モデルを用いた粒界偏析の計算

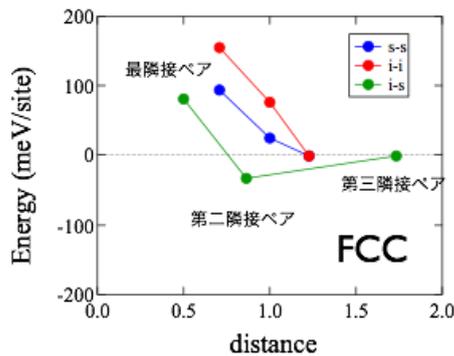


図 4. Fe-Ti-C 系における二体クラスターに働く原子間相互作用エネルギー

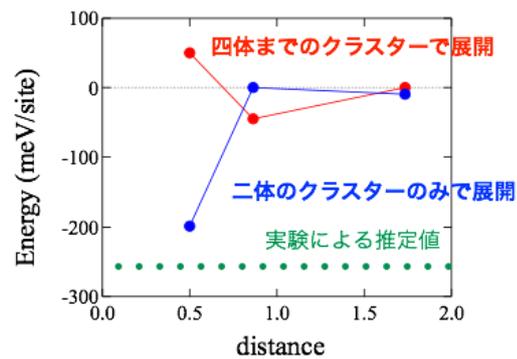


図 5. Ti と C の二体間の相互作用エネルギー

＜研究実施内容及び成果＞

粒界相モデルを用いて Fe 中での B をはじめとする種々の元素の粒界偏析係数を計算し、実測値との対比を行った。自由エネルギーの計算には第一原理計算とクラスター展開法を用いた。さらにアモルファス状態と液相では短範囲規則性がさほど大きくなく、両者の自由エネルギーは大差ないことを考慮して、ランダム構造である粒界相を液相の自由エネルギーで近似して粒界偏析の計算を行った。図 6 は既存の熱力学的解析の結果を用いて 1000K における B、P、C、Mn の粒界偏析係数を計算した結果である。B は添加量が小さい領域では偏析係数が $10^4 \sim 10^5$ という非常に高い値を示すが、通常の添加量では 10^3 のオーダーと考えられる。P はそれよりも 1桁小さい程度の偏析量で、C は 10 倍から 100 倍の間、Mn はほとんど偏析しない結果となった。実験では C は計算結果よりも多く偏析する可能性があるが、B、P、Mn についてはおよそ実験結果をよく再現できる結果が得られている。この一致の原因を考えるために、液相の構造と粒界相の構造の関連性に注目し、粒界偏析は粒界における局所的な多面体構造の空隙に原子が固溶することにより粒界構造を安定化する過程、すなわち粒界多面体構造に偏析元素が包含されて局所的規則構造を作る過程である可能性を示した。

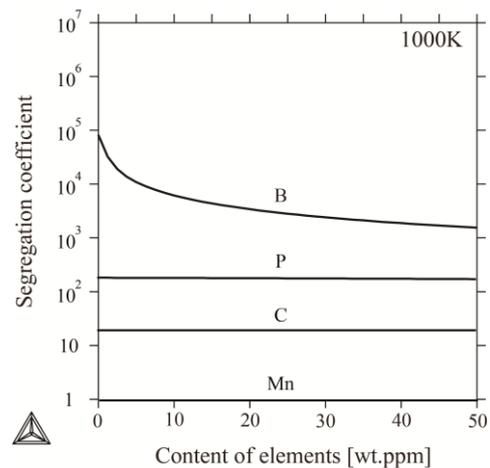


図 6. 粒界相モデルによる鉄中の元素の粒界偏析係数の計算結果 (1000K)。

3. 1. 5 クラスター展開とモンテカルロ法を用いたクラスタリングの可視化

◀研究実施内容及び成果▶

本項目では、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。このような計算を行うことにより、人為的な操作を排除した純粋に理論的な組織発展の挙動が把握できる。計算には4体クラスターにより第5隣接位置までの相互作用を考慮し、 $20 \times 20 \times 20$ の FCC 格子点上で原

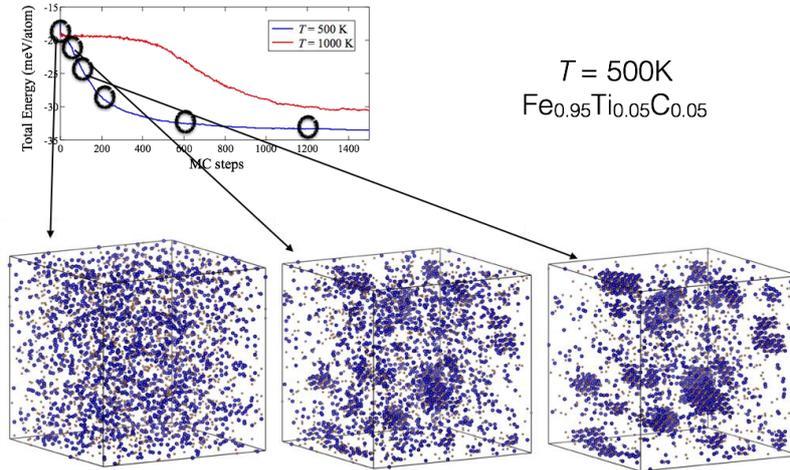


図 7. Fe-Ti-C3元系でのモンテカルロシミュレーションの結果。

子置換を行いながら 500K と 1000K における Fe-Ti-C3元系と Fe-Cr-C3元系の組織の時間発展を計算した。その結果、図 7 に示したように Fe-Ti-C3元系では 5at.%Ti、5at.%C の合金組成において 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。Fe-Ti-C3元系でみられたクラスタリングは、古原グループにより実験的に観察されている炭化物析出の前駆段階に対応している可能性がある。

3. 1. 6 金属液体の自由エネルギーの評価

4. 1. 4で述べた粒界偏析の熱力学モデル構築に関連して、金属液体の構造について第一原理分子動力学計算法を用いて検討を行った。この手法を用いて Fe-Al 2 元系合金液体の自由エネルギーを、原子数 200 の系で Nosé-Hoover 法で温度制御を行いながら、第一原理分子動力学法により計算した。具体的には原子振動速度の状態密度分布を気体成分と固体成分に分離し、各成分の状態密度の積分から液体の振動エントロピーを、電子系のエントロピーも考慮しながら評価した。方配置のエントロピーは、ある原子の周りに存在する異種原子の存在確率から統計力学的に計算した。さらにエンタルピーは全エネルギーのステップ依存性解析して得られたエネルギー分布から計算した。こ

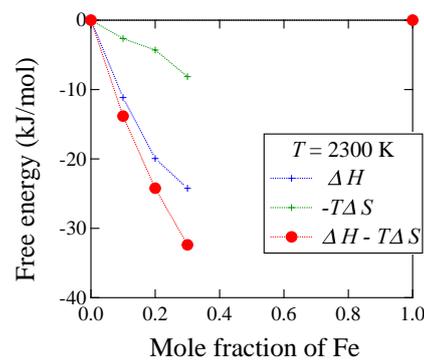


図 8. 第一原理計算によって評価した Fe-Al2元系合金の自由エネルギー。

3. 2 炭素・窒素と合金元素の相互作用エネルギーの評価(大阪府立大学 沼倉グループ)

3. 2. 1 炭素・窒素の固溶度への合金元素の影響による評価

≪研究実施内容≫

多成分系単相溶体において成分間に相互作用がはたらくとき、各成分の活量あるいは溶解度は他の成分の濃度により変化する。融鉄及び γ 鉄におけるC, Nと合金元素の相互作用は、これを定量的に調べてワグナーの現象論にもとづいて解析することにより評価されてきた。この方法では、成分*i*の活量係数 γ_i が成分*j*によって変化する度合いを表す「相互作用係数」 $\varepsilon_i^{(j)}$ (具体的には、 $\partial \ln \gamma_i / \partial x_j$ の無限希薄(成分*i*と*j*の濃度 $x_i, x_j \rightarrow 0$)への外挿値)を求める。このパラメータを用いると、 x_i と x_j の関係は $x_i = x_i^0 \exp(-\varepsilon_i^{(j)} x_j)$ と表される。ここで x_i^0 は成分*j*が存在しないときの成分*i*の平衡濃度である。

相互作用係数を実験で求めるには、合金元素(成分*j*)の濃度がわずかず異なる複数のFe-s希薄合金を用意して同一のCまたはN(成分*i*)の活量のもとで浸炭または窒化し、各合金試料に吸収されたC, Nの濃度(x_i)を分析すればよい。これは概念的には単純であるが、 α 相においてはそもそもC, Nの固溶度が著しく低いいため実験が難しく、これまで α 鉄中のC, Nと合金元素の相互作用をこの方法で調べた研究は非常に少なかった。本研究では、当グループが培ってきた実験技術によって、 α 鉄におけるC/N(侵入型溶質*i*)と合金元素(置換型溶質*s*)の希薄極限での*i*-*s*溶質原子1対1の相互作用を系統的に調べた。対象とした合金元素は鉄鋼において重要な3d遷移元素Ti, V, Cr, Mn, Ni、および3p典型元素Al, Si, Pである。(ただし本報告執筆時点でTiに関してはまだ結果が得られていない。)

≪成果≫

実験結果の例として、一定活量の下で浸炭/窒化したときのC, N吸収量におよぼすCrの効果を図9に示す。浸炭はメタンと水素の混合ガスで、窒化はアンモニアと水素の混合ガスで、それぞれ一定温度で行った。浸炭/窒化の時間は直径1mmの線状試料の表面から侵入したC, N原子が拡散により中心まで一様な濃度になるのに必要な最低限の時間としており、その間のCr原子の拡散は概ね無視できる条件となっている。複数のデータの組は、異なるC/N活量で浸炭/窒化したときのデータで、得られる相互作用係数がC, Nの濃度の絶対値に依存しないことを確かめるものである。図9(a)に示すように、一連の試料に吸収されたCの量はCr濃度によらずほぼ一定である。これは、固溶C-Cr原子間には相互作用がほとんどないことを示している。これに対し、図9(b)では吸収されたNの量はCr濃度が高いほど多く、CrとNの間に引力的な相互作用がはたらくことが明らかである。これらの結果から求めた相互作用係数の値はCr-Cが -1 ± 5 、Cr-Nが -58 ± 3 である。

これらの実験では、上述のようにCr原子の拡散はほとんどおこらない条件で浸炭/窒化しているので、Cr原子はランダムに分布したままの「パラ平衡」の条件下でC, N原子との1対1の相互作用の効果を調べている。(次に述べるスヌーク緩和の実験で、窒化においてはCr原子の凝集はおこっていないことを確かめている。)ところが、もしこの浸炭/窒化処理を長時間続けると真の平衡状

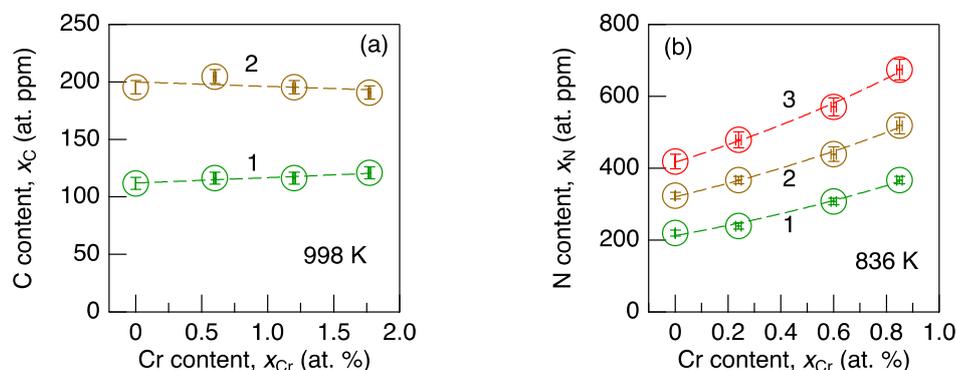


図9. 一定のC/N活量の下で浸炭/窒化したFe-Cr希薄合金中のCとNの濃度。

態(オルソ平衡)に近づいてゆき、浸炭では M_2C_6 ($M = Fe, Cr$)、窒化では CrN の析出がおこる。そういった相変態までには至らないとしても、Cr 原子の拡散が進めば、多数の Cr 原子と C/N 原子が集合した、合金炭化物/窒化物の核となる溶質原子のクラスターが形成される可能性がある。

過去のいくつかの研究において、 α 鉄における Cr と C との相互作用は融鉄や γ 鉄中と同様に引力的であると報告されているが、それらの実験においては平衡化時間が長く、Cr 原子の拡散が無視できない条件となっていた。今回の Cr-C の相互作用が弱いという結果は、これらの報告や、Cr は安定な炭化物を作る元素なので C とは親和性があるはずという常識に反しているが、i, s 溶質原子の存在状態が異なるのであれば矛盾にはならない。溶質成分間の相互作用は原子間の配置すなわち結晶中での局所的な環境に依存するはずであり、たとえば一つの Cr-C 隣接対の結合エネルギーと、Cr 原子と C 原子が n 個集合した $(CrC)_n$ クラスターでの一組の CrC あたりの生成エネルギーは等しくはないであろう。本研究では相互作用係数の温度依存性も調べており、合金炭化物・窒化物を形成する合金元素ではいずれも高温ほど負に大きくなる(相互作用がより引力的になる)傾向がみられた。熱力学的には引力的($\epsilon < 0$)、斥力的($\epsilon > 0$)いずれの場合も高温では相互作用係数はゼロに近づくはずだが、その原理に反するこのような挙動は、高温での浸炭/窒化においては置換型溶質原子の拡散が無視できなくなり、炭化物・窒化物の核となる高次のクラスターが生成・成長したためと考えられる。

このような考察にもとづいて、一部の合金元素については i-s 溶質原子の微視的な分布状態も考慮して温度依存性を外挿して推定し、C, N 原子と置換型溶質 s との 1 対 1 の原子間相互作用に起因する相互作用係数を求めた。結果を図 10 に示す。 α 鉄における N とこれらの合金元素 s との相互作用は、融鉄及び γ 鉄と同様に、s の周期表の位置に対して系統的に変化している。すなわち、Fe よりも左に位置する元素との相互作用は引力的で、Fe から離れるほど強くなる。いっぽう右に位置する元素との相互作用は概ね反発的である。融鉄と γ 鉄では C との相互作用も同じ傾向を示すことが知られているが、今回の研究により、3d 遷移元素と炭素の希薄組成における原子間相互作用は、N とは異なり弱いことが初めて明らかとなった。

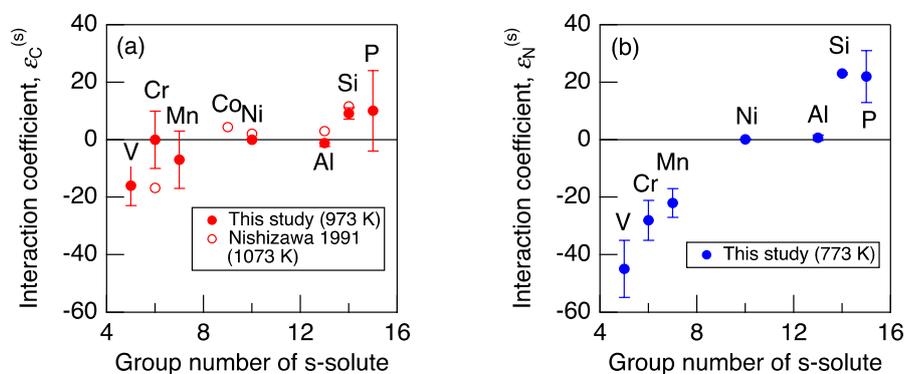


図 10. α 鉄における置換型溶質 s と C (a), N (b) の相互作用係数。

相互作用係数は多成分系の熱力学の枠内で現象論的に定義されるパラメーターであるが、溶媒である固体結晶の中で置換型溶質原子 s と C, N 原子との間の微視的相互作用と関連付けることができる。簡単な例が、C, N 原子が占有しうる位置がすべて等価ではなく、エネルギーが異なるサイトが何種類か存在するというモデルである。たとえば、異なるサイトが 1 種類で、そのエネルギーが一般のサイトよりも低い「2 準位系トラップモデル」では、相互作用係数とエネルギー差 ΔE との関係が $\epsilon_i^{(s)} = (z/m)[1 - \exp(-\Delta E/kT)]$ と導かれる。ここで z は s 原子(トラップ中心)1 個あたりの等価なトラップサイトの数、 m は溶媒原子 1 個あたりの i 原子の占有サイト数(bcc 結晶中の八面体格子間サイトに対しては 3)である。トラップサイトが何処であるかを仮定すれば、得られた相互作用係数の値から相互作用エネルギーをこの式によって求めることができる。しかし、浸炭・窒化実験においては i 原子が化学ポテンシャル一定の条件で外界から添加されるので、 ΔE で表される局所的な相

相互作用に加えて、s 原子による溶媒結晶の性質の大局的な変化を通じて i 原子の固溶度が変化する効果加わる。今回、Marcel Sluiter 博士(デルフト工科大学)の協力を得て s 原子による鉄結晶の体積変化が C, N の溶解熱に与える効果を定量的に評価し、相互作用係数をこの大局的效果と局所的な原子間相互作用の効果の寄与に分けて解析できるようになった。

以上のとおり、 α 鉄における炭素・窒素の固溶度への合金元素の影響から i-s 相互作用を評価する方法を確立し、7 種の合金元素に対して実験をおこないその値を推定・決定した。得られたデータは希薄三元固溶体の熱力学データとして有用であることに加えて、次に述べるスヌーク緩和から得られる知見と合わせて、低炭素・低窒素フェライト鋼中の固溶 C, N 原子の挙動を制御するパラメータである ΔE の精密評価に資するものである。以上の結果はその概略を国際会議の招待講演で発表し論文としても公表したが [Numakura H., Proc. 3rd Int. Symp. on Steel Science (2012); Arch. Metall. Mater. 60 (2015)], 個々の実験結果の詳細は今後順次論文として発表する予定である。

3. 2. 2 固溶 C, N 原子によるスヌーク緩和への合金元素の影響による評価

≪研究実施内容≫

体心立方結晶中の八面体格子間位置に固溶する侵入型溶質原子は正方対称の点欠陥で強い一軸性のひずみを有するので、適当な外部応力加えると三種類の等価で向きが異なるサイト間を再配向し、スヌーク緩和と呼ばれる特徴的な力学緩和現象を引き起こす。鉄中に固溶した C, N によるスヌーク緩和にある種の合金元素が著しい影響を与えることは古くから知られていたが、沼倉らはこれを理論的・定量的に解析して合金元素と C, N 原子との相互作用エネルギー ΔE を求める方法を約 15 年前に確立し、V-N および Cr-N の 1 対 1 の相互作用エネルギーを決定した [Guan et al., Mater. Sci. Eng. A 370 (2004), 73]。今回 CREST においてはこの手法を用いて三つの課題に取り組んだ：(1) 他の合金元素と C, N との相互作用を求める、(2) トラップ効果により形成される i-s 原子対あるいは複合体の構造(幾何学的配置)を単結晶を用いた実験により決定する、(3) 高次の i-s 溶質原子クラスターの形成挙動を明らかにする。

実験に用いた試料は固溶度の実験と同一で、浸炭/窒化温度から急冷して過飽和固溶状態とし、動的剛性率と対数減衰率(エネルギー損失)を、逆吊りねじり振り子型の装置を用いて振動数 1 Hz 程度の共振自由減衰法で測定した。

≪成果≫

第一の課題に関しては、局所的な引力相互作用がはたらく組み合わせについては、トラップサイトと ΔE を仮定して緩和スペクトルを理論的に描き、実験結果をよく再現するモデルから推定するという方法 [Guan et al., 2004] で、次の結論が得られた。V-N: -0.21 eV (第一近接)、Cr-N: -0.18 eV (第一近接)、Mn-N: -0.19 eV (第一近接) および -0.11 eV (第二近接)。実験結果の例として、Fe-Cr-C と Fe-Cr-N の力学損失プロファイルを図 11 に示す。Cr は C のスヌーク緩和にはほとんど影響を与えないが、N の緩和プロファイルは Cr の添加によって大きく形を変える。これらの結

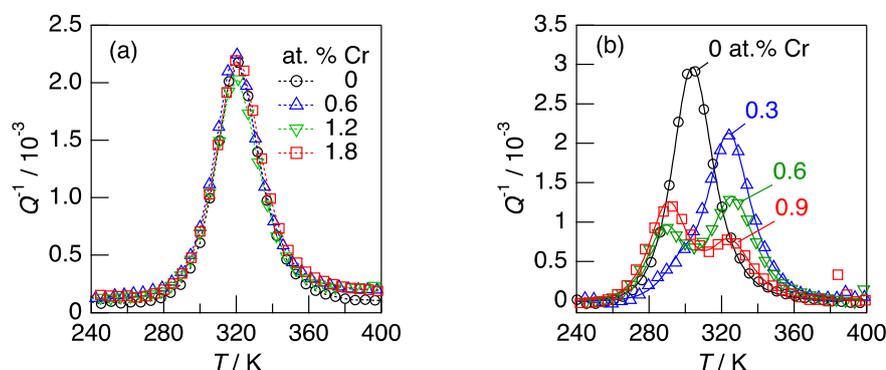


図 11. Fe-Cr-C (a) と Fe-Cr-N (b) 希薄固溶体におけるスヌーク緩和プロファイル。C と N の濃度はそれぞれ約 110 at. ppm, 200 at. ppm。

果は固溶度の実験結果(図 9(a), (b))とよく対応している。図 11(b) では、Cr 濃度 0.3 at.% において 300 K に位置する通常のスヌーク緩和ピークはすでにほぼ消えて 320 K のピークが主となっている。これは Cr 原子の近傍にトラップされた N 原子の再配向ジャンプに起因する緩和と考えられる。さらに Cr 濃度が高い試料(0.6, 0.9 at.%) ではこの緩和が小さくなり、もとのスヌーク緩和ピークよりも低い温度に別の緩和成分が現れる。これは、もとの Fe-Cr 固溶体中で比較的近い位置にあった二つの Cr 原子の近傍にトラップされた N 原子のジャンプに起因するものと推測される。このような Cr-N-Cr 複合体における N 原子の占有位置のエネルギーは、Cr 濃度依存性から考えると 1 対 1 の Cr-N 近接対のエネルギーよりも低いことになる。この高次の複合体は(Cr, N)ナノクラスタの核となるものと推測される。

Fe-Cr-C のように、引力相互作用がないと考えられる系ではスヌーク緩和に明瞭な変化が現れないのでこの手法で評価することはできない。しかし、V, Cr, Mn, Si, P を添加すると C の単位濃度あたりのスヌーク緩和の強度が小さくなり、また Fe-Al-C/N では高温側に新たな緩和成分が現れることが明らかになった。これらはまだ詳しく解析・検討できていないが、C, N 原子の周囲のひずみがこれらの s 原子の添加によりどのように変化するかを理論計算によって調べることで、定量的な情報を引き出すことができる可能性が示唆される。今後検討したい。

第二の課題については、第三年度に単結晶育成装置を設計・製作して取り組んだ。まず「ひずみ焼鈍法」によって Fe-0.6%Cr 合金の単結晶試料を作製し、N を添加してスヌーク緩和を測定した。図 11(b) の 320 K のピークの緩和強度の結晶方位依存性から、Cr-N 近接対の対称性は正方対称または $\langle 100 \rangle$ 斜方対称であることが判明した。近接対の構造は、N 原子が Cr 原子の第一近接八面体格子間位置にトラップされている正方対称の配置か、 $\langle 110 \rangle$ 斜方対称の第二近接配置のいずれかと考えられるが、後者は観測された結晶方位依存性と相容れないので、前者の第一近接配置であると結論される。また、図 11(b) の低温側の緩和の方位依存性が高温側の緩和と同様であるという結果も同時に得られた。Cr-C-Cr 複合体の構造としては、まず二つの Cr 原子が第二近接位置にあり、N 原子がその両者の中央(第一近接八面体位置)か、あるいは両者の第二近接八面体位置にある配置が考えられるが、第一原理計算によれば二つの Cr 原子が第一あるいは第二近接などの近い配置をとるのは不利であると示唆されているので、配置を決めるには今後さらに詳しく検討する必要がある。

3. 2. 3 第一原理計算による i-s 相互作用の評価と起源の解明

◀研究実施内容▶

フェライト鋼の材料設計においては室温付近における局所的な相互作用エネルギーの値が重要となる。しかし、固溶度の実験で求められるのは 700~1000 K の温度範囲における実効的な相互作用エネルギーであり、いっぽうスヌーク緩和では強い引力的相互作用の組み合わせ以外は評価が難しい。これらの難点を補う意味と、各元素の組み合わせにおける相互作用の起源を理解することを目的として、第一原理計算により i-s 相互作用を電子論的観点から研究した。CREST において新たにワークステーションとソフトウェア(第一原理計算パッケージ VASP と計算環境 MedeA)を導入し、さらに東北大学金属材料研究所計算材料学センターの共同研究で同センターのスーパーコンピュータを利用した。

◀成果▶

まず単独の B, C, N, O が bcc 鉄中に固溶した状態を正確に理解することを目的として、スーパーセル法を用いて固溶状態のエネルギー、状態密度、電子の空間分布などを計算した。i-s 溶質原子間の相互作用エネルギーを正確に計算するのが最終目的であるので、溶解エンタルピーを正確に求めることに取り組んだ。溶解エンタルピーは一般の欠陥の形成エネルギーに対応するが、スーパーセル法で欠陥の形成エネルギーを計算すると隣接するスーパーセルにも存在する同じ欠陥との相互作用が避けられない。この結果、スーパーセルのサイズと形を固定して原子位置のみを最適化する計算(ひずみゼロ条件)では形成エネルギーは真の値よりも高く、スーパーセルも含めて全て最適化する計算(応力ゼロ条件)では低くなる。この問題を解消すべく、隣接セルの溶質原子との弾性相互作用を補正する方法を検討していたところ、2013 年の秋にフランスのグループが

その方法を論文発表したので、以後これを採用して具体的な計算を進めた。サイズが bcc 単位胞 3^3 個 (原子数 54) 程度の比較的小さいスーパーセルであっても、みかけの弾性相互作用を補正すると無限に大きなスーパーセルへの外挿値に非常に近い値が得られることが明らかになった。この結果は最近論文にまとめ **Physical Review B** 誌に投稿した。また、この計算の過程で必要となった純鉄と Fe-C, Fe-N 合金の結晶弾性定数を計算し、これに先立って論文発表した [Souissi & Numakura, ISIJ Int. 55 (2015), 1512]。

これまでの他の研究者の理論計算では、さまざまな置換型溶質原子と C 原子の相互作用を網羅的に調べ、そのほとんどが近接位置では斥力的という結果で、実験では (炭化物を作る元素については) 引力的なはずなので、このような理論計算は実験と定性的にすら一致しないと考えられていた。しかし本研究の実験によって炭化物生成元素と C との相互作用は引力的とは限らないことが明らかになり、さらに、第一原理計算では少なくとも Cr-C と Cr-N に関しては実験を定性的には説明できる結果が得られ、計画よりはかなり遅れたが、相互作用を電子論から明らかにできる可能性が見えてきた。今後、状態密度や電子の空間分布を詳しく解析するなどして、引き続き Sluiter 博士と協力しながら研究を進めてゆく。

3.3 クラスタリング制御による鉄鋼材料の高強度化(東北大学 古原グループ)

3.3.1 フェライト中ナノクラスター・析出物の構造解明と力学特性評価

《研究の狙い》

自動車用鋼の更なる高強度化および強度—延性バランスの改善は、今後の輸送機器の軽量化にとって必須の課題である。鉄鋼の高強度化では、析出物の分散による強化が最も有効な手段として知られている。微細析出物による析出強化量は、硬質析出物によるオロワン機構を考えると微細かつ高密度に分散するほど増加するため(図 12(a))、ナノクラスターやナノ析出物の利用が高強度化には有効であるが、ナノ組織解析の困難さから十分に活用されているとは言い難い。近年、炭化物生成傾向の強い Ti、Nb、V 等のマイクロアロイング元素を添加することで、オーステナイト(γ)→フェライト(α)変態時の移動する異相界面に合金炭化物が繰り返し核生成する相界面析出現象(図 12(b))を誘起し、合金炭化物のナノ析出組織を得て高強度・高延性の自動車用の低合金低炭素薄鋼板および中高炭素機械構造用鋼の開発に利用されているが、異相界面におけるナノ析出物形成およびナノ析出物が機械的特性に及ぼす影響は不明である。本項目では、マイクロアロイング鋼で相界面析出する合金炭化物組織を定量化し、その分布の支配因子および特性への影響を明確化することで、ナノ析出制御による力学特性の設計、析出強化に有効なマイクロアロイング元素添加の低減の可能性を追及する。

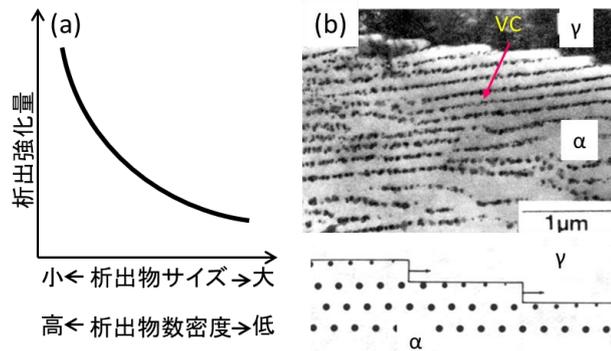


図 12. (a)硬質粒子による析出強化量と析出物分布との相関関係、(b) α/γ 界面での V 炭化物(VC)の相界面析出の透過電顕写真。

《実施内容》

0.05～0.5%の範囲で含有量を変えた V、Ti、Nb 添加低炭素鋼を種々の温度で保持してフェライト変態させ、走査型電子顕微鏡(SEM)によりマクロな相変態組織を観察した上で、特定領域から収束電子ビーム(FIB)加工によりサンプリングして析出物分布を三次元アトムプローブ(3DAP)を用いて評価した。更に同じフェライト粒の局所的な力学特性をビッカース硬度計およびナノインデンテーション測定(NIMS 津崎グループとの共同研究)で評価するとともに、マクロな特性を引張試験により測定した。また、ナノ析出物の結晶構造を高分解能透過型電子顕微鏡(TEM)観察より決定した(米国バージニア工科大 村山准教授との共同研究)。

《成果》

V 添加材の相界面析出組織の TEM 観察により、析出した炭化物は NaCl 構造の VC であることを明らかとなった。3DAP 解析での炭化物分布の定量化により、同一試料内でも場所によって分布が大きく異なることが明らかになった。このため、同一視野での結晶方位解析と 3DAP 測定、ナノインデンテーション測定を組み合わせた組織・特性評価手法をまず確立して、析出組織の不均一性と特性との相関について調査した。その結果、相界面析出した炭化物の分布および局所硬度は α/γ 界面構造に強く依存し、整合性の良い α/γ 界面では析出がほとんど起こらないのに対して、整合性の悪い界面では大きな界面拡散係数、高い界面エネルギー、容易な溶質偏析に起因して炭化物が核生成しやすいため、界面整合性が悪くなるほど炭化物の数密度が増加することが明らかとなった。

上記の結果を踏まえて、各種添加元素の相界面析出におよぼす影響は全て整合性の悪い α/γ 界面において析出した炭化物分布を比較することで調査した。図 13(a)に Nb、V、Ti 添加量と α 硬度の関係を示す、いずれの元素も添加量が増加するにつれ、より多量の合金炭化物が析出するようになるため析出強化量は単調に増加する。同じ添加量で比較すると、V より Ti や Nb 添加の方が有効に析出硬化することが分かる。これは、Ti や Nb 添加材の方がより微細・高密度に炭化物が析

出するためである。しかしながら、Ti や Nb 炭化物は V 炭化物に比べて熱力学的により安定なため、添加量の増加はさらに高温での溶体化処理を必要とし、実際に利用が困難である。そこで、Ti、Nb 添加量を抑制しながら高強度化を図るため、Ti あるいは Nb と V の複合添加の影響を調査した(図 13(a))。その結果、V 添加量の一部を Ti に置換した 0.1V+0.1Ti 複合添加材は 0.2V 単独添加材に比べ、二倍の析出強化量が得られることが明らかとなった。一方、0.1V+0.1Ti 複合添加材の硬度は 0.2Ti 単独添加材とほぼ同じであるが、溶体化を兼ねたオーステナイト化温度の低下が可能で、フェライト変態組織の微細化による延性向上が期待できる。

次に、変態温度、元素添加量、添加元素の種類を変えた試料での相界面析出組織を調査し、炭化物析出の支配因子について検討した。移動する α/γ 界面での局所的な化学組成を考慮して、析出駆動力で合金炭化物の数密度を整理したところ、添加元素が同じならば、変態温度や添加量が異なっても析出駆動力と炭化物粒子の数密度には良い相関があることが明らかとなった(図 13(b))。また、上記の因子以外にユビキタス元素である Mn、Si、N 添加により界面での化学組成を変化させることで析出駆動力を変えて炭化物分布を制御できることを見出した。一方で、V、Nb、Ti 添加材での傾向は異なることから、炭化物/母相間の界面エネルギーや界面偏析など駆動力以外の因子も影響していることも示唆された。

フェライト単相の低炭素鋼について種々の相界面析出炭化物が強度・延性に及ぼす関係を調査した結果、図 14(a)に示すように、粒子半径 2nm まで単調に析出強化量が増加し、変形後には炭化物周囲にオロワン機構の発現を示す転位ループが観察されていることから(図 14(b))、応力下で運動する転位によりナノ炭化物はせん断されず Orowan 機構による強化が働くという重要な知見が得られた。このことは、炭化物の分散をさらに微細化することでより高い強度が得られる可能性を示唆している。一方、延性については、析出粒子によりフェライト素地への転位の導入が均一化されることで、マイルドな加工硬化と転位の動的回復による高歪み領域での変形集中とボイド形成の抑制効果が期待される。その影響により、炭化物の分散が微細なほど強度—延性バランスが向上することを明確化した。

ナノ析出強化したフェライト鋼では、均一伸びは強度が上昇してもあまり低下しないのに対して、

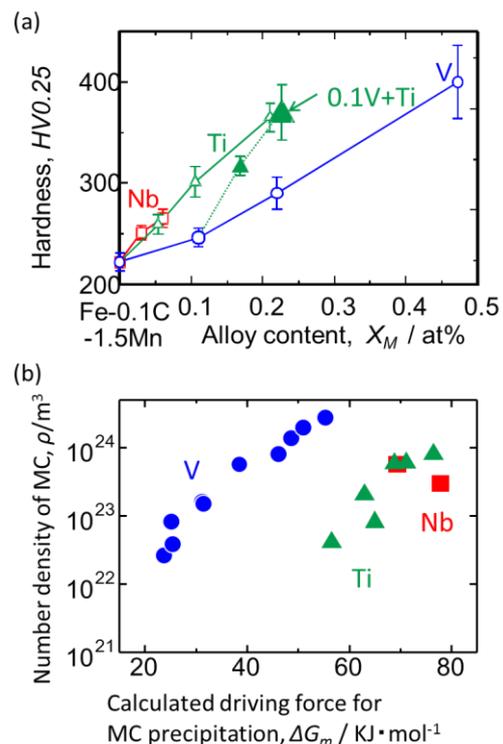


図 13. (a) 923K 変態処理材におけるフェライトの強度と元素添加量の関係, (b) 炭化物の数密度と析出駆動力の関係

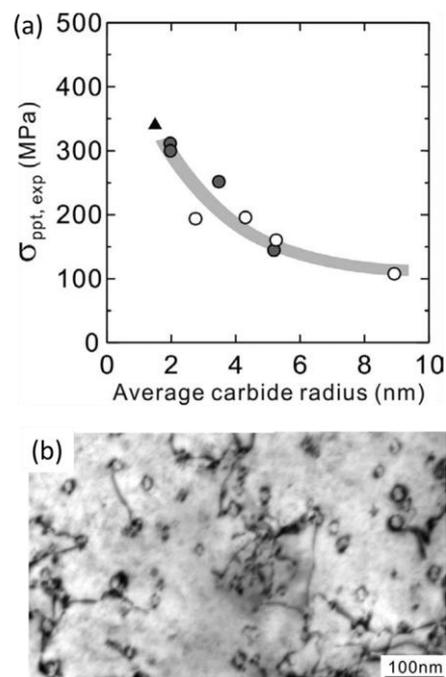


図 14. (a)析出強化量と炭化物粒径の関係, (b)0.3%V 添加鋼における 10%変形後の転位組織

局部伸びが比較的大きいことが特徴である。次に、ナノ炭化物析出のない低炭素鋼において強度・延性バランスの向上に有効であるマクロな変態組織の複合化およびフェライト粒径微細化の影響の検討を行った。具体的には、高温でオーステナイトに加工を施すことで、フェライト組織を微細化させ、その後の変態保持処理において変態完了前に焼入れることで未変態母相を硬質なマルテンサイトとし、相界面析出で強化されたフェライト+マルテンサイトの複相組織を得た(図 15(a))。その結果、図 15(b)に示すように VC 析出により強度が大きく増加する一方で、局部延性も改善されること、フェライト組織を微細化することで延性が更に顕著に改善され、両者の組み合わせにより高強度・高延性化が達成されることを見出した。特にネッキング後破断に至るまでの局部延性が改善されていたことから、相界面析出および結晶粒微細化強化によるフェライトの強化によりマルテンサイトとの強度差が減少し、フェライト/マルテンサイト間の歪分配が低減されることで、フェライトの不均一変形によるボイドの発生および連結が抑制されたと考えられる。

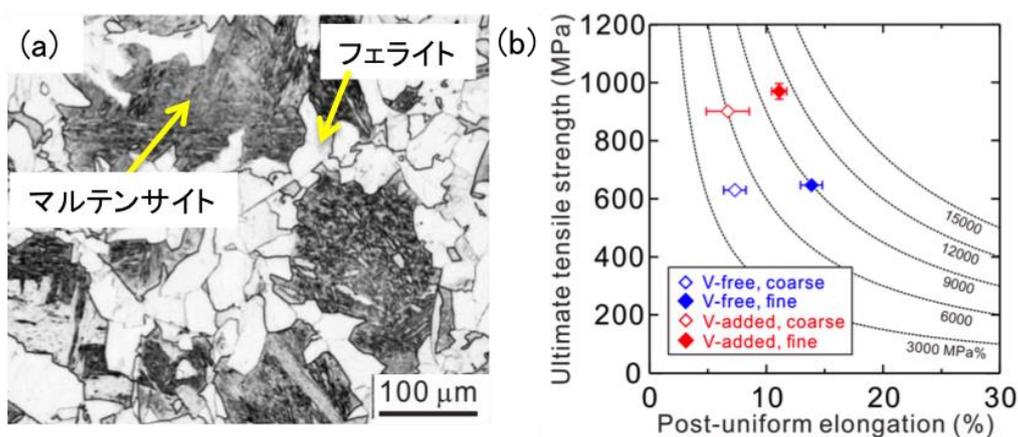


図 15. (a) VC 相界面析出フェライト+マルテンサイト複合組織鋼の光学顕微鏡組織、(b)強度—局部延性バランスに及ぼす複合組織化とフェライト粒径微細化の影響。

3. 3. 2 窒化時のナノクラスタリング・析出のダイナミクス解明

≪研究の狙い≫

代表的な鉄鋼材料の表面硬化処理の1つである窒化処理は、機械部品の耐摩擦・摩耗特性を向上させる手段として多くの輸送・産業機械に応用されている。窒化物生成元素 (Al、V、Ti、Cr 等) を含むフェライト合金を窒化すると、試料表面から流入した窒素と窒化物生成元素が結合して、表面近傍でナノメートルサイズの微細な元素クラスター・ナノ析出物が形成されて表面が硬化するが、添加元素の種類によって析出および硬化挙動が大きく異なる(図 16)。種々の元素を添加した低合金鋼の窒化時に生成するナノクラスター・合金窒化物の構造およびその生成ダイナミクスと表面硬化挙動を解明することで、窒化処理によるナノクラスター・ナノ析出組織および表面硬化挙動制御の指導原理を確立する。

≪実施内容≫

少量の Al、Cr、Ti、V を含む鉄合金を種々の温度で窒化して、窒化表面から内部への硬度分布を調査し、特定の窒化深さにおける析出物分布を評価するため、FIB を用いてサンプリングした試料を 3DAP および透過型電子顕微鏡(TEM)を用いて組織観察を行った。また、窒化層の窒素濃度を電子線プローブ分析装置(FE-EPMA)を用いて評価した。

≪成果≫

窒化物生成元素である Ti、V、Al、Cr を添加したフェライト合金を窒化すると、Al 添加材を除く他の合金では大きな表面硬化が得られた。その中でも、Ti や V 添加材における硬度上昇が大き

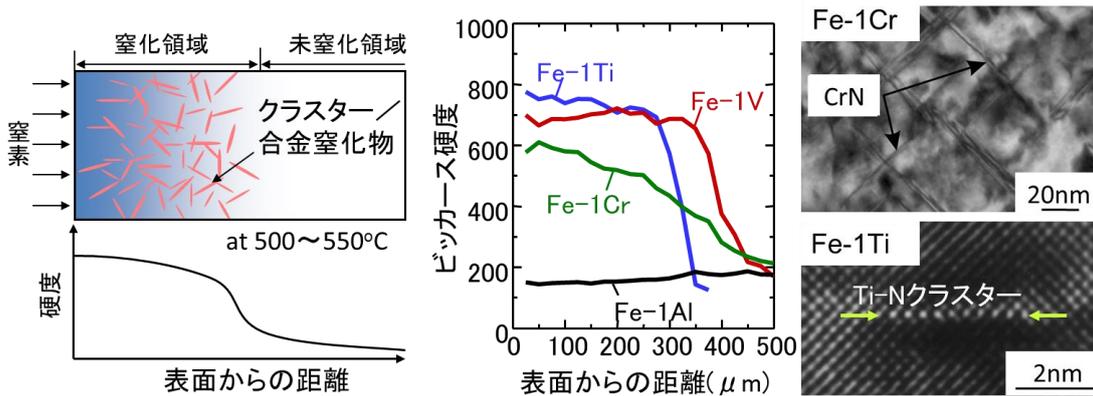


図 16. フェライト鋼の窒化組織と表面硬化

い。これらの窒化層の析出組織を観察したところ、Al 添加材では Al 窒化物は析出せず、Cr 添加材では、平衡窒化物であるやや粗大な板状 CrN が生成していること(図 16)、窒化層中の Cr 窒化物分布の TEM および 3DAP による定量解析により、表面での高い硬度に対応して内部に比べ表面付近ほど CrN がより高密度・微細化することを見出した。大きな表面硬化が見られた Ti および V 添加材では、モノレイヤーおよび2~3原子層厚さの Ti-N、V-N クラスターが生成しており(図 16)、これらのナノクラスターが顕著な表面硬化を引き起こしていることが明確になった。窒化層の窒素濃度測定より、Ti、V 添加材では添加元素が平衡窒化物形成に必要な窒素量とフェライト中の最大固溶窒素量の合計よりも多くの窒素が検出され、観察された非平衡クラスター生成を支持する結果が得られた。Fe-s-N 系の bcc フェライト相における相分離傾向の熱力学計算では、Fe-Al-N 系では相分離が起こりえないのに対して、Fe-(Ti, V, Cr)-N 系では s-N が濃縮した bcc 相が相分離により形成されうることから、添加元素による著しい析出組織形成傾向の違いが熱力学的見地からも裏付けられた。また、このような合金窒化物生成による表面硬化原理は炭素添加した Fe-M 合金のマルテンサイト材の窒化においても働いていることを確認した。

窒化による表面硬化を促進するために、窒化物生成挙動の異なる Al、V、Cr を選びこれらの複合添加の影響をフェライト合金について調査した。図 17 に窒化した複合添加材、単独添加材の

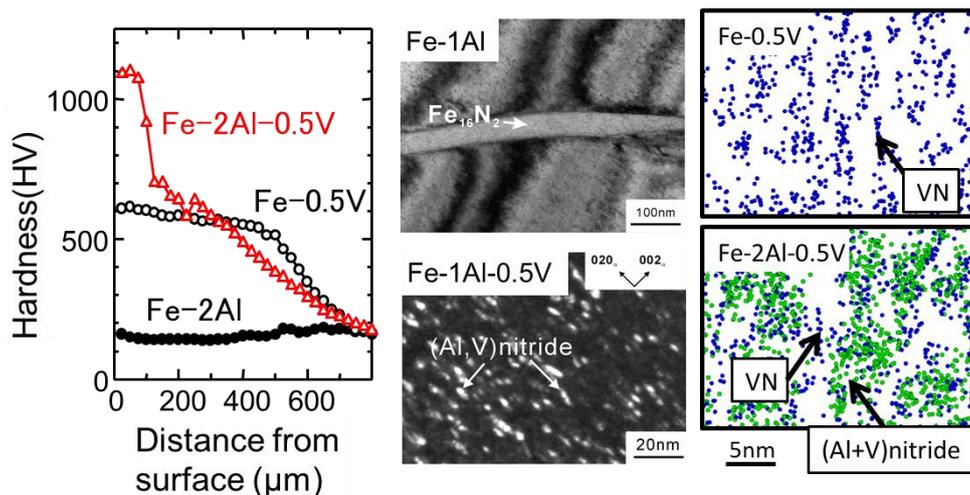


図 17. Fe-2at%Al 合金に強クラスター生成元素(V)を添加した場合の硬化挙動および窒化層の析出組織の変化 (550°C16h 窒化材, 単独添加と複合添加の比較).

硬度分布および、窒化層での析出組織を示す。ほとんど表面硬化を示さない Fe-Al 合金に V や Cr を添加することで HV1000 を超える大きな表面硬化が得られる。Fe-1Al 合金では Al 窒化物は生成せず、粗大な鉄窒化物が見られるのに対して、0.5%の V 複合添加により、高い表面硬度に対応して析出物分布が顕著に微細・高密度化していることが分かる。更に、3DAP 測定により、単独添加材では合金窒化物として析出しない Al が複合添加材では (Al, V) 複合窒化物として析出することを見出した。ただし、Cr, V 添加材でも (Cr, V) 複合窒化物が観察されたが、両複合添加材での析出挙動には違いがあり、図 18 に示すように、Al-V 複合添加の場合には、より N と強く結合する V が先行して VN を形成し、VN/フェライト界面を核生成サイトとして AlN が析出する結果、硬度分布には屈曲が現れ二段の効果を示す。一方、Al-Cr 複合添加材では、N 流入とともに両元素が同時に析出する(図 18 参照)ことで、連続した硬度分布を保ちながら大きな硬度上昇を示す。両元素の窒素との結合力の違いが大きな場合には分離析出型、結合力が近い場合には同時析出型となり、添加元素の窒素との親和性を制御することで硬度分布の形状制御ができると考えられる。

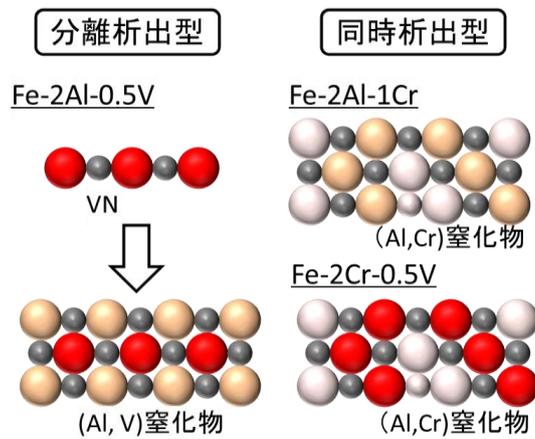


図 18. 複合添加材におけるナノ析出物の析出促進機構

3. 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)

3. 4. 1 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

《研究の狙い》

微量の固溶元素が強化に及ぼす機構の微視モデルを確立するため、ナノインデンテーション法や TEM 内その場変形などの最先端解析技術を活用し、局所力学挙動を精緻に評価することによって、固溶元素や析出物と転位との相互作用に基づく塑性変形の素過程を明らかにする。

《実施内容》

種々の Fe 二元系合金に対して、ナノインデンテーション法、TEM その場変形によってサブミクロンスケールの領域の弾塑性変形挙動を直接的に測定し、固溶元素量や元素種の影響について実験的に評価する。ナノインデンテーション法では、ある条件下において荷重-変位曲線の負荷過程にポップインと呼ばれるひずみバースト現象が現れることが知られており、これが塑性変形の開始に対応することが実験的に明らかにされている。ポップインが発生する圧入深さの典型値は 10-20 nm 程度であり、極めて微小な領域の変形挙動を直接計測できることから、転位論に基づく微視モデルの解明に寄与すると期待される。

《成果》

図 19 は、種々の固溶炭素を含む Fe-C 二元系合金における荷重-変位曲線の例である。いずれの炭素量でも、矢印で示されるようにポップインが明瞭に現れている。Ti 添加 IF 鋼を固溶炭素ゼロと見なすと、固溶炭素量の増加とともにポップインが発生する臨界荷重値 P_c が上昇する傾向がみられる。種々の純金属単結晶の実験結果より、 P_c は剛性率に正比例することが明らかにされており、図 19 の結果は固溶炭素による剛性率効果を直接的に示したものと理解できる。図 20 は、Fe-Si 二元系合金において得られたポップイン現象の臨界荷重 P_c とそれに対応する変位バースト Δh の関係を示している。固溶ケイ素量が 1、3 wt% の場合に対して 5 wt% の場合は、同一の P_c に対する Δh が小さな値を示している。 Δh がポップインの瞬間に発生する転位数に比例するモデルに基づく、固溶ケイ素量が多い場合は塑性変形開始に際する転位増殖機能が低いことを示唆している。ここでの転位の増殖機能とは、外力により蓄積された弾性ひずみエネルギーが駆動力となって瞬時に多量の転位を放出する挙動における弾性ひずみエネルギー当たりの転位数を意味しており、破壊力学におけるエネルギー解放率に類似した考え方である。ケイ素添加による増殖機能の低下は、ケイ素添加量の増加に伴い脆化が顕著になる特性変化の一因であると考察した。

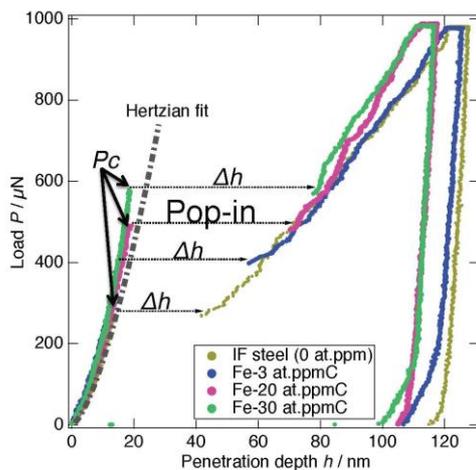


図 19. 種々の固溶炭素を含む Fe-C 二元系合金における荷重-変位曲線。

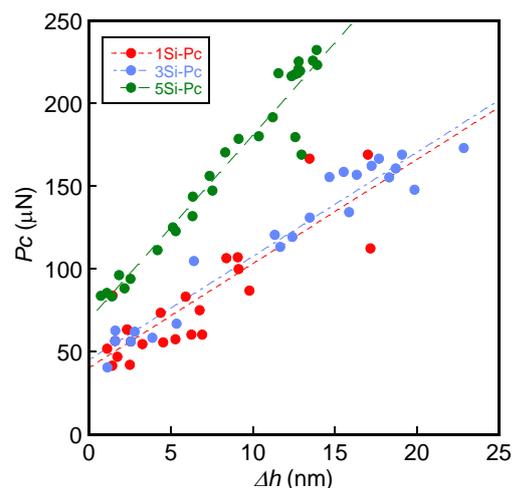


図 20. 種々の固溶ケイ素を含む Fe-Si 二元系合金における P_c と Δh の関係。

塑性変形機構の素過程を TEM その場変形手法で解析する課題については、IF 鋼を用いた実験で、流動応力の実測と転位密度の計測に成功した。図 21 は、(a)応力-ひずみ曲線と(b)転位組織を示す TEM 像である。TEM 像に示される転位は、大多数の転位線の方向が<111>に平行であることから、らせん成分が支配的であると判断される。両者を同期させることにより、流動応力と転位密度の関係を定量的に得ることができる。Johnston Gilman モデルで定式化される転位易動度 \bar{v} とせん断応力 τ の関係は以下で表される。

$$\bar{v} \propto \tau^m$$

ここで、 m は応力指数である。Orowan モデルにおける転位密度 ρ と易動度 \bar{v} の関係を介して、転位密度と流動応力の関係が得られ、応力指数 $m \sim 7$ を求めることに成功した。この値は、刃状転位で求められた値 40 よりも顕著に小さな値である。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。

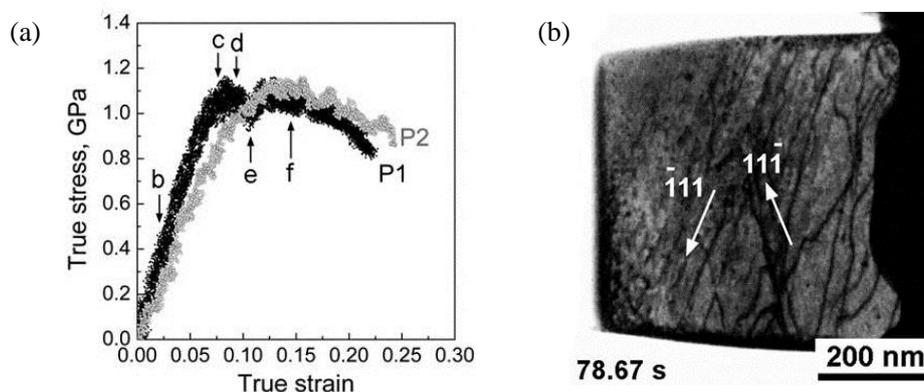


図 21 IF 鋼における TEM その場変形で得られた(a)応力-ひずみ曲線と(b)転位組織を示す TEM 像。大多数の転位線が<111>に平行であり、らせん転位支配型を示している。

3. 4. 2 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

3. 4. 2. 1 Mo フリー高靱性棒鋼の開発

≪研究の狙い≫

リン(P)は、0.1 wt%未満の微量であっても、それが含まれると鋼を脆化させる典型的な有害元素である。それは、Pが結晶粒界へ偏析する傾向が強く、しかも粒界結合力を弱める効果があるためである。この現象は粒界脆化として知られており、脆性的な粒界破壊により衝撃吸収エネルギーを低下させるとともに延性-脆性遷移温度(DBTT)を上昇させる。このため、靱性が要求される部品用の鉄鋼材料では、製錬によるPの低減および結晶粒微細化による組織制御に加えて、Pの粒界偏析を抑える元素であるMoの添加が必須であった。JIS規格ではP量を0.03%に低減した上でMoを0.2%添加した機械構造用鋼が設定されている。しかし、P精錬のコストは高く、Moは希少元素である。ここでは、マイクロ組織制御によって有害元素Pを無害化して、MoフリーでPを許容できる高強度高靱性棒鋼を開発する。

≪実施内容≫

マイクロ組織制御のカギは、テンプフォーミング(tempforming)と呼ばれる加工熱処理プロセスである。加工熱処理の主要部は、マルテンサイト組織の形成のための焼入処理と、その後の温間域での溝ロール圧延によって構成される。金属マイクロ組織の特徴は、微細でリボン状に伸びた結晶粒組

織と特徴的な結晶方位である。(より厳密には微細で圧延方向 (RD) に伸びた結晶粒組織と強い $\langle 110 \rangle // RD$ 繊維状圧延集合組織)。このプロセスで得たマイクロ組織を持つ材料は、高強度であっても衝撃特性が画期的に向上することを我々は見出していた。このプロセスを P 含有高強度鋼に適用した(図 22)。

対象とした材料は、JIS-SCM440 鋼相当の 0.4% C、0.25% Si、0.73% Mn、0.001% S、1.0% Cr、0.2% Mo、 $<0.001\%$ O、 $<0.004\%$ N (wt%)であり、P 量を 0.001%とした高純度鋼から JIS 規格の最大値 0.03%を超える 0.093%までの 5 種類の鋼材である。また、最終的には Mo を含まない 0.05%P 材を製造して Mo フリーP 許容鋼の達成を試みた。機械的試験は JIS 規格のシャルピー衝撃試験と引張試験を主に実施し、EPMA などでマイクロ組織を詳細に観察した。

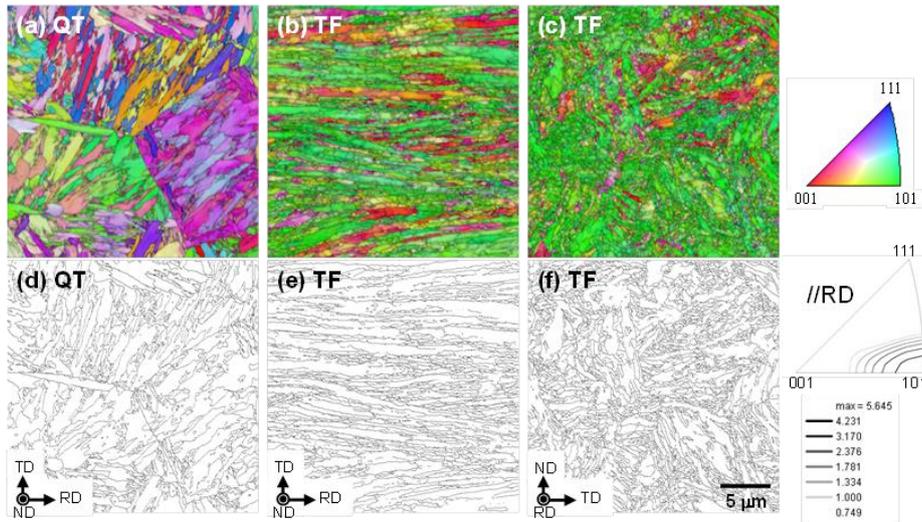


図 22. 通常の焼入焼戻処理した材料 (QT) とテンプフォーミング処理した材料 (TF) の金属マイクロ組織。0.093%P 材。

《成果》

もっとも特徴的かつ顕著な成果として従来材と開発材の室温での衝撃試験の結果を図 23 に示す。図中の QT は Quench and Temper で通常の焼入焼戻処理の材料、TFは Temp Forming で開発材料である。ともに引張強さは 1200MPa に調整されている。(a)に見られるように、通常処理材 QT は P 量が増えると衝撃値が減少に 0.053%で 25J 以下となる。靱性が必要な部材での条件が 100J 以上であるので使えない材料というわけである。これに対して開発材では P 量にかかわらず衝撃値が 150J と高い。さらに、0.093%P ではむしろ衝撃値が増加している。有害元素 P がむしろ靱性に有効に作用しているわけである。その理由は(b)に試験後の試験片を示すように、0.093% P の開発材 (TF) ではデラミネーション(delamination; 層状破壊)という縦割れが生じて主き裂の伝播を抑制するためである。この層状破壊と P の関係を明らかにするために 0.093%P 開発材の試験後の試験片を EPMA で詳細に観察した。結果を図 24 に示す。赤く示された P 量が多い領域が試験への長手方向に平行に伸びていて、それに沿って層状破壊が起こっている。つまり割れやすい P 濃

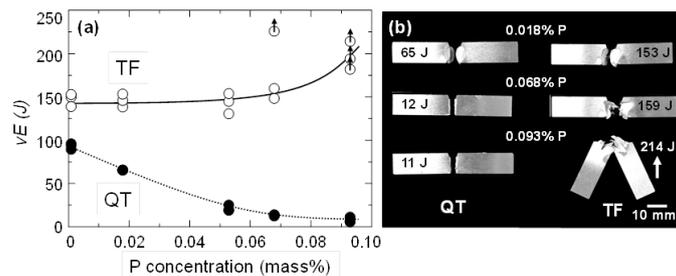


図 23. (a) 室温でのシャルピー衝撃値と P 量の関係および(b)試験後の試料の写真。

度が高い。さらに、0.093%P ではむしろ衝撃値が増加している。有害元素 P がむしろ靱性に有効に作用しているわけである。その理由は(b)に試験後の試験片を示すように、0.093% P の開発材 (TF) ではデラミネーション(delamination; 層状破壊)という縦割れが生じて主き裂の伝播を抑制するためである。この層状破壊と P の関係を明らかにするために 0.093%P 開発材の試験後の試験片を EPMA で詳細に観察した。結果を図 24 に示す。赤く示された P 量が多い領域が試験への長手方向に平行に伸びていて、それに沿って層状破壊が起こっている。つまり割れやすい P 濃

化域が有効に働いているわけである。このような主き裂とは進行方向の異なる割れによる靱性向上は crack toughening や delamination toughening として知られている。本開発では、P の分布状態と制御することでデラミネーション発生を促し P を大量 (JIS 規格での許容値の 3 倍以上) に含んでも、靱性が逆に向上するような画期的な材料を開発することができた。さらに Mo をフリーにしてもテンプレフォーミング処理した開発材 (0.05%P) は優れた靱性を示すことを確認し、Mo フリーで P を許容した高強度高靱性棒鋼の最終目標を 2015 年夏に達成した。

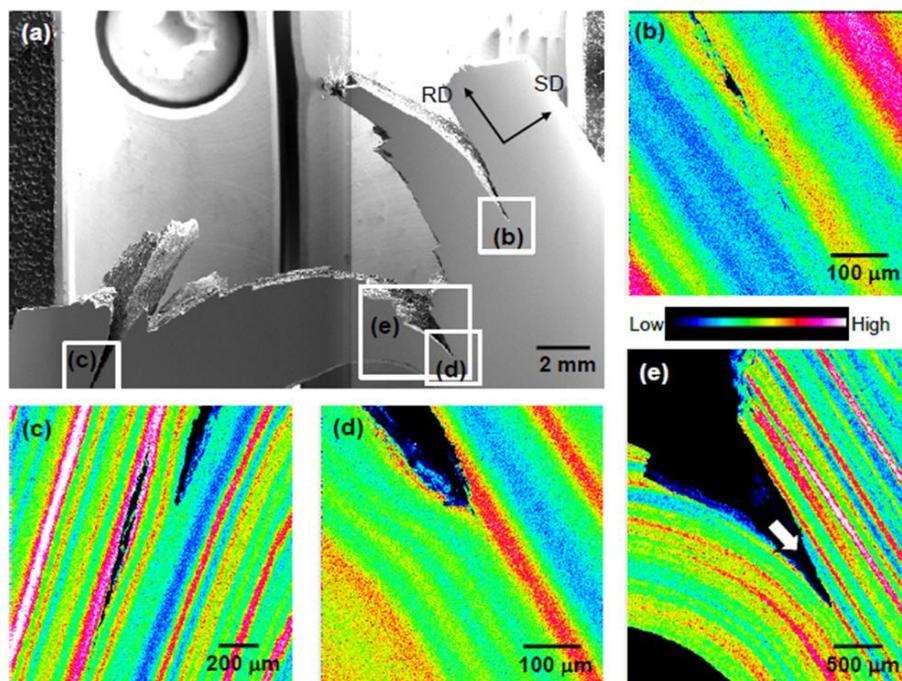


図 24. 0.093%P-TF 開発材のシャルピー試験後の P の EPMA 分析結果。

研究プロジェクトでは、さらに、破壊発生メカニズム解明と開発材の安全な使用法に寄与するために、この層状破壊の発生条件を 2013 年度から詳細に検討した。その一例としてシャルピー衝撃試験の温度依存性を 3 種類の P 量の材料で調査した結果、次の 3 点を明らかにした。(1) 全温度範囲で、従来材 QT よりも添付フォーミング処理した開発材 TF の方が高い衝撃靱性値を示した。(2) 層状破壊は、開発材 TF のみで現れる。(3) 層状破壊は P 量が多くなるほど、より広範な温度範囲で現れる。これらのデータをもとに層状破壊発生メカニズムを考察した。(成果を記した論文は最近掲載された。Mater.Sci.Eng.A, **649** (2016) 135-145.)

以上、本研究成果は、粒界脆化元素である P を層状破壊の促進に活用できるように結晶粒界組織を制御すると、衝撃吸収エネルギーが高まることを示したもので、不純物元素を製錬で除去するのではなく、積極的に活用する事例を示したものとして画期的である。

3. 4. 2. 2 Ni フリー新耐候製鋼の開発 (高靱性高強度鋼棒材の開発 (NIMS 津崎グループ))

≪研究の狙い≫

ユビキタス元素で構成される Al-Si 鋼 (Fe-0.16C-0.6Al-0.6Si-1.5Mn) は 1%Ni 耐候性鋼と同等以上の耐食性を示す上に結晶粒微細化で強度と靱性を向上させることができるためユビキタス耐候性高強度鋼として期待されていた。しかし、HAZ ボンド (溶接金属に隣接する HAZ 部) の靱性が低いという弱点のために実用化が見送られていた。溶接できない鉄鋼は他の特性がいくら良くても溶接構造用には使えない。

本研究では B の高い粒界偏析能に注目して、その ppm 程度の微量添加で HAZ 組織を制御することにより HAZ ボンド靱性を向上させて、Ni フリーの新耐候性鋼を開発することが最終目的であ

る。この目的の達成のために、量産用の Al-Si 耐候性鋼の製造や実溶接継ぎ手部での靱性評価など、メカニズム解明に加えて実用化に必要な開発研究も合わせて遂行したところに特徴がある。

《実施内容》

Al-Si 耐候性鋼の化学組成を表1に示す。素材はまず NIMS 内で 20kgf インゴットとして作成した。Al、Si、Mn の組成は変えずに C 量と B 量を変えた素材を

表1 開発に用いた Al-Si 耐候性鋼の化学組成

Composition (mass %)							
C	Si	Al	Mn	P	S	B	Fe
0.08	0.6	0.6	1.5	<0.002	<0.003	0.0006	Bal.
-0.23						-0.0056	

作成した。この素材から 11×11×110 mm の試験片を作成し、この試験片に溶接ボンド部の熱サイクルに相当する入熱を与え、溶接継ぎ手の冷却速度と同等の速度で冷却して、溶接継ぎ手のボンド部のマイクロ組織を模擬した試験片を作成した。この試験片からシャルピー試験片 (V-ノッチ) を加工して衝撃試験を行った。その他、引張試験や硬さ試験などの機械試験を行うとともに詳細なマイクロ組織観察による靱性発現のメカニズム解明を行った。実施内容のまとめを図 25 に示す。

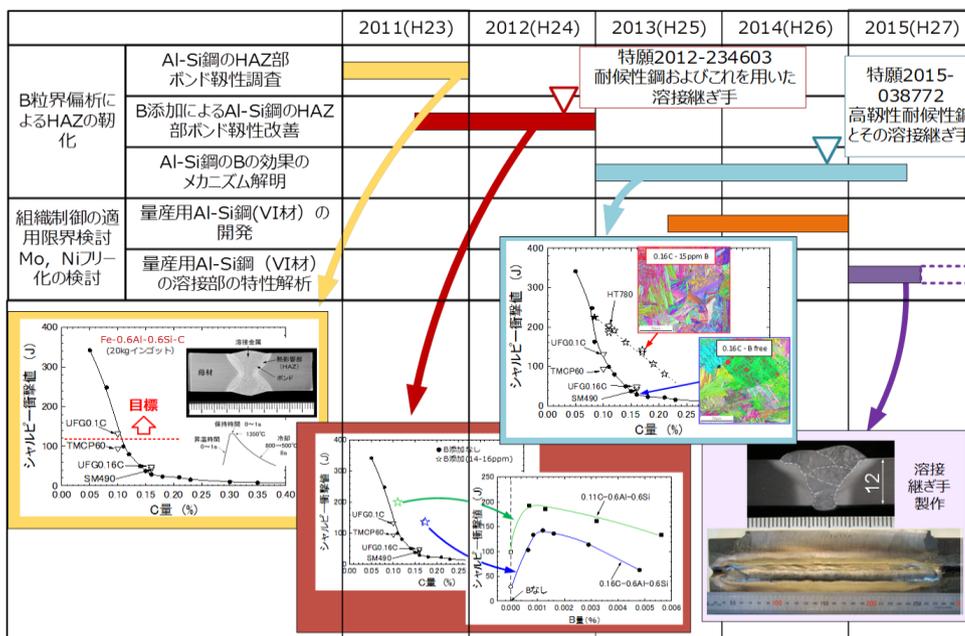


図 25. Ni フリー新耐候性鋼の開発のための研究実施内容の概略

《成果》

もっとも特徴的かつ顕著な成果として、B を添加した Al-Si 鋼 (☆印) と、B を添加しない Al-Si 鋼 (●印) について 273 K の吸収エネルギーを調べた結果を図 26 に示す。さらに、市販の鋼材 (SM490、HT590、HT780) や Si-Mn 系の微細粒鋼 (UFG0.1C、UFG0.16C) の吸収エネルギーも併せて示す (▽印)。B を添加しない Al-Si 鋼や Si-Mn 系微細粒鋼では C 量が増加すると吸収エネルギーが低下している。これに対し、B 添加 Al-Si 鋼では吸収エネルギーが、2~3 倍に増加している。C が 0.08% になると B 添加 Al-Si 鋼と B 無添加鋼の吸収エネルギーはほぼ同じ値を示し

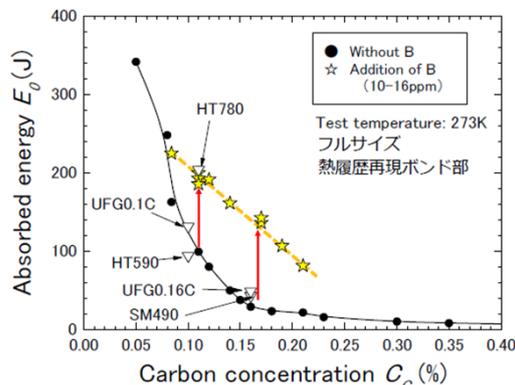


図 26. B 添加による衝撃値の変化

た。また最適な B 量を求めるために、C 量が 0.11、0.16% の Al-Si 鋼について B 量を変えて吸収エネルギーを調べ(図 26 中の結果)、B 量が 10ppm 程度の場合にシャルピー衝撃値がピークを示した。これら現象のメカニズムを解明するために詳細な組織観察を行った。その結果、B がオーステナイト結晶粒界に著しく偏析すること(図 27)、これによって HAZ 再現熱処理時のオーステナイト→フェライト変態に影響を与えてマイクロ組織が微細化すること(図 28)を明らかにした。

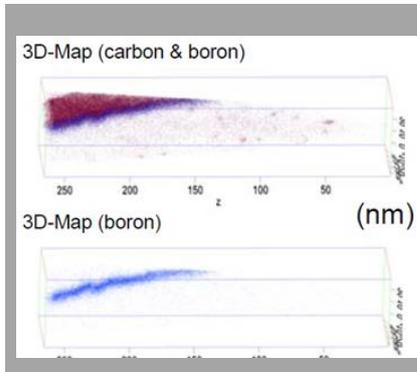


図 27. AP による B 分布測定

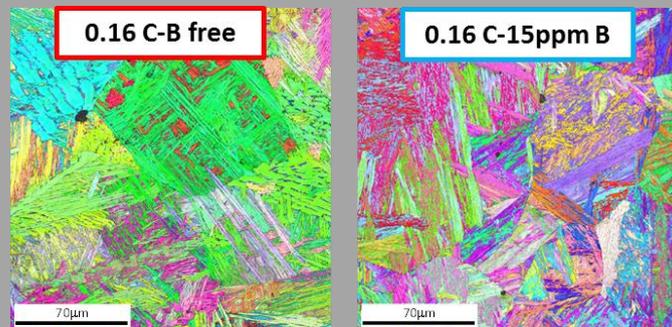


図 28. B 添加した HAZ 再現処理部のマイクロ組織

このような知見をもとに 2 トンの大型鋼材の溶解を行い、大型化の効果を検証した。その結果、大型鋼材の場合も NIMS 試作材と同等の特性と B の効果を確認した(図 29)。

現在、この大型鋼材を用いて実際の溶接継ぎ手部を作成している(図 25 右下図)。この実際の溶接継ぎ手部において特性が確保できればプロジェクト目標を達成したことになる。今年 12 月までには結果が得られる予定。

3.5 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)

《研究の狙い》

九大における転位論と破壊力学の研究ポテンシャルを活かして NIMS 津崎グループの目標達成に貢献する。

《実施内容と成果》

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。具体的には先に示した 2 トン溶解製造の大型鋼材から厚さ 14mm 幅 28mm 長さ 120mm の三点曲げ CTOD 試験片を圧延方向と平行に作成して、-40°C、0°C、室温、+60°C での破壊靱性試験を行った。その結果を図 30 に示す。大型鋼材は 580MPa 級ハイテンとして良好な靱性を示している。材料強度設計に使える CTOD 靱性値を得たことは実用化に向けて価値が高い。

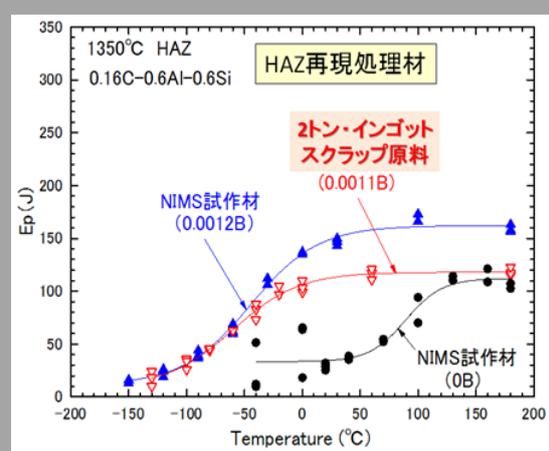


図 29. 大型鋼材での B 添加の効果

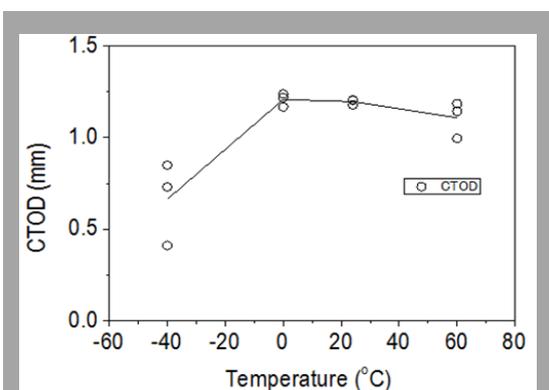


図 30. 大型鋼材の CTOD 破壊靱性試験

§ 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 4件、国際(欧文)誌 46件)

1. 著者、論文タイトル、掲載誌 巻、号、発行年

<国内>

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. 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
3. 榎木勝徳, 大谷博司, “材料の熱力学物性の電子論計算と状態図計算への応用”, ふえらむ, Vol.19, No.11, pp. 841-847, 2014.
4. 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.

<国際>

1. 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.
2. 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.
3. 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, No. 11, pp.942-945, 2011.
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.
5. M. Jafari, Y. Kimura and K. Tsuzaki, "Enhanced upper shelf energy by ultrafine elongated grain structures in 1100MPa high strength steel", Materials Science and Engineering A, Vol.532, pp. 420-429, 2012.
6. 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
7. Hiroshi Ohtani, “Thermodynamic study on grain-boundary segregation of boron in iron”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), The Iron and Steel Institute of Japan, pp. 99-108, 2012.
8. Numakura Hiroshi, “Interaction between interstitial and substitutional solute atoms in iron”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), The Iron and Steel Institute of Japan, pp. 19-28, 2012.
9. Souissi Maaouia, Chen Ying, Numakura Hiroshi, “First-principles approach to the nature of light elements dissolved in α iron”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), The Iron and Steel Institute of Japan, pp. 147-150, 2012.
10. Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi, “Formation of nano-sized cluster and nitride during nitriding of ferrous alloys”, Proceeding of the 3rd International Symposium on Steel Science, (ISSS 2012), The Iron and Steel Institute of Japan, pp. 51-57, 2012.
11. Tadashi Furuhashi, Kenji Takahashi, Naoki Takayama, Goro Miyamoto, Taishi Fujishiro, Masanori Minagawa: “Effects of Mo and B addition on bainite transformation in low-carbon low-alloy steels”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), The Iron and Steel Institute of Japan, pp.

- 159-162, 2012.
12. Goro Miyamoto, Kunio Shinbo, Tadashi Furuhashi, "Quantitative measurement of carbon content in Fe-C binary alloys by atom probe tomography", *Scripta Materialia*, Vol. 67, No. 12, pp.999–1002, 2012.
 13. K. Sekido, T. Ohmura, T. Hara and K. Tsuzaki, "Effect of Dislocation Density on Initiation of Plastic Deformation on Fe-C Steels" *Materials Transactions*, Vol. 53, No.5, pp. 907-912, 2012.
 14. 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*, Vol. 577, Suppl. 1, pp. S636-S641, 2013.
 15. Goro Miyamoto, Ryota Hori, Behrang Poorganji, Tadashi Furuhashi, "Crystallographic analysis of proeutectoid ferrite / austenite interface and interphase precipitation of vanadium carbide in medium carbon steel", *Metallurgical Materials Transaction A*, Vol. 44, No. 8, pp. 3436-3443, 2013.
 16. Y.-J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, "Effects of alpha/gamma orientation relationship on VC interphase precipitation in low carbon steels", *Scripta Materialia*, Vol. 69, No.1, pp.17-20, 2013.
 17. Zhenqing Liu; Goro Miyamoto; Zhigang Yang; Tadashi Furuhashi, "Direct measurement of carbon enrichment during austenite to ferrite transformation in hypoeutectoid Fe-2Mn-C alloys", *Acta Materialia*, Vol. 61, No. 8, pp. 3120-3129, 2013.
 18. Meysam Jafari, Yuuji Kimura, Kaneaki Tsuzaki, "Toughening by the addition of phosphorus to a high-strength steel with ultrafine elongated grain structure", *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 93, No. 2, pp. 109-115, 2013.
 19. Zhenqing Liu, Goro Miyamoto, Zhigang Yang, Tadashi Furuhashi, "Excess carbon enrichment in austenite during intercritical annealing", *Metallurgical Materials Transaction A*, Vol. 44A, No. 11, pp. 4872-4875, 2013.
 20. Yusaku Tomio, Shigeki Kitsuya, Goro Miyamoto, Kei-ichiro Ohishi, Kazuhiro Hono, Tadashi Furuhashi, "Plasma Nitriding Behavior of Fe-C-M (M=Al, Cr, Mn, Si) Ternary Martensitic steels", *Metallurgical Materials Transaction A*, Vol. 45A, No. 1, pp. 239-249, 2013.
 21. 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.
 22. Naoya Kamikawa, Yoshihisa Abe, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi, Yoshimasa Funakawa, "Tensile behavior of Ti,Mo-added low carbon steels with interphase precipitation", *ISIJ Inter.*, Vol. 54, pp. 212–221, 2014
 23. 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, 2014.
 24. Zhenqing Liu, Goro Miyamoto, Zhigang Yang, Chi Zhang, Tadashi Furuhashi, "Effects of pre-tempering on intercritical annealing in Fe-2Mn-0.3C alloy", *Metall. Mater. Trans. A*, 45A, pp. 5290-5294, 2014.
 25. T. Furuhashi, K. Tsuzumi, G. Miyamoto, T. Amino, G. Shigesato, "Characterization of Transformation stasis in low-carbon steels with microalloying of B and Mo", *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 45, pp 5990-5996, 2014.
 26. L. Zhang and T. Ohmura, "Plasticity initiation and evolution during nanoindentation of an iron–3% silicon single crystal", *Phys. Rev. Lett.*, 112, 145504. 2014.
 27. L. Zhang, N. Sekido and T. Ohmura, "Real time correlation between flow stress and dislocation density in steel during deformation", *Mater. Sci. Eng.*, A611, pp. 188-193, 2014.
 28. Y. Xia, G. Miyamoto, Z. -G. Yang, C. Zhang, T. Furuhashi, "Direct measurement of carbon enrichment in the incomplete bainite transformation in Mo added low carbon steels", *Acta Mater.*, Vol. 91, pp. 10–18, 2015.
 29. Z. -Q. Liu, G. Miyamoto, Z.-G. Yang, C. Zhang, T. Furuhashi, "Carbon enrichment

- in austenite during bainite transformation in Fe-3Mn-C alloy”, *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 46A, No. 4, pp. 1544-1549, 2015.
30. Y. Xia, G. Miyamoto, Z. -G. Yang, C. Zhang, T. Furuhashi, “Effects of Mo on carbon enrichment during proeutectoid ferrite transformation in hypoeutectoid Fe-C-Mn alloys”, *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 46, No. 6, pp. 2347-2351, 2015.
 31. Y.-J. Zhang G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, T. Ohmura, T. Suzuki and K. Tsuzaki, “Effects of Transformation Temperature on VC Interphase Precipitation and Resultant Hardness in Low Carbon Steels”, *Acta Mater.*, 84, pp. 375–384, 2015.
 32. Souissi Maaouia, Numakura Hiroshi, “Elastic properties of Fe-C and Fe-N martensites”, *ISIJ International*, Vol. 55, No. 5, pp. 1512-1521, 2015.
 33. Tadashi Furuhashi, Goro Miyamoto, Naoya Kamikawa, “Strengthening of Medium-Carbon Forging Steels by Interphase Precipitation”, *Proc. Int. Conf. Advances in Product Metallurgy of Long and Forged Products*, AIST, pp. 26-32, 2015.
 34. Tadashi Furuhashi, Naoya Kamikawa, Goro Miyamoto, “Importance of Phase Transformations in Development of Modern High Strength Steels”, *Proceedings of International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM 2015)*, pp. 15-16, 2015.
 35. H. Kubo, G. Miyamoto, T. Furuhashi, “Alloying Effects on Microstructure of Fe-1mass%M Binary Alloys Treated by Nitriding and Quenching Process”, *Proceedings of International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM 2015)*, pp. 29-30, 2015.
 36. Y. -J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, “Dominating Factor on the Dispersion of VC Interphase Precipitation in V-Added Steels”, *Proceedings of International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM 2015)*, pp. 191-192, 2015.
 37. G. Miyamoto, S. Suetsugu, K. Shinbo, T. Furuhashi, Surface hardening and nitride precipitation in nitriding of Fe-M1-M2 ternary alloys containing Al, V and Cr, *Metallurgical Materials Transaction A*, Vol. 46A, pp. 5011-5020, 2015.
 38. Numakura Hiroshi, “Solute-solute interaction in α iron: the status quo”, *Archives of Metallurgy and Materials*, Vol. 60, Iss. 3, pp. 2061-2068, 2015.
 39. Hideyuki Ohtsuka, Van An Dinh, Takahisa Ohno, Kaneaki Tsuzaki, Koichi Tsuchiya, Ryoji Sahara, Hideaki Kitazawa and Terumi Nakamura, “First-principles calculation of effects of carbon on tetragonality and magnetic moment in Fe-C system”, *ISIJ International*, Vol. 55, No. 11, pp. 2483-2491, 2015.
 40. Naoya Kamikawa, Kensuke Sato, Goro Miyamoto, Mitsuhiro Murayama and Tadashi Furuhashi, “Stress-strain behavior of ferrite and bainite steels with nano-precipitation”, *Acta Materialia*, Vol. 83, No. 15, pp. 383–396, 2015.
 41. Naoya Kamikawa, Masahiro Hirohashi, Yu Sato, Elango Chandiran, Goro Miyamoto and Tadashi Furuhashi, “Tensile behavior of ferrite-martensite dual phase steels with nano-precipitation of vanadium carbides”, *ISIJ International*, Vol. 55, No. 8, pp. 1781–1790, 2015.
 42. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Naoya Kamikawa, Kunio Shinbo, Tadashi Furuhashi, “Precipitation Strengthening by VC/NbC/TiC Interphase Precipitation in Low-carbon Steels”, *ASIA STEEL2015*, pp. 344-345, 2015
 43. Elango Chandiran, Yu Sato, Naoya Kamikawa, Tadashi Furuhashi, “Effect of phase distribution on tensile behavior of ferrite-martensite dual phase steels with nano-precipitation”, *ASIA STEEL2015*, pp. 516-517, 2015.
 44. X. Min, Y. Kimura, T. Kimura, K. Tsuzaki, “Delamination toughening assisted by phosphorous in medium-carbon low-alloy steels with ultrafine elongated grain structures”, *Mater. Sci. Eng.*, A649 (2016) 135-145.
 45. D. Ueyama, Y. Saitoh, N. Ishikawa, T. Ohmura, S. Semboshi, F. Hori and A. Iwase, “Hardness modification of Al-Mg-Si alloy by using energetic ion beam irradiation”, *NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION*

B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS, Vol. 351, pp. 1-5, 2015.

46. D.F. Carpeno, T. Ohmura, L. Zhang, M. Dickinson, C. Seal and M. Hyland, "Softening and compressive twinning in nanosecond ultraviolet pulsed laser-treated Ti6Al4V alloy", Scripta Mater., Vol. 113, pp. 139-144, 2016.

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 古原 忠:「高強度・高機能化に向けた加工熱処理・解析技術」, 第 209, 210 回西山記念技術講座「革新的な鉄鋼材料を生み出す組織制御技術とメタラジの進歩」, 日本鉄鋼協会, pp. 45-62, 2012.
2. 沼倉 宏,「鉄中の溶質原子間相互作用 — 元素戦略の基礎研究 —」, 日本学術振興会 耐熱金属材料第 123 委員会研究報告, 53 巻 3 号, pp. 321-325, 2012.
3. 沼倉 宏,「フェライト鋼における固溶元素の機能と溶質原子間相互作用: 基礎と新知見」, 金属学会セミナー「構造材料の元素戦略」テキスト, 日本金属学会, pp. 15-20, 2013.
4. 沼倉 宏,「溶質原子間相互作用の実験と理論」, 日本鉄鋼協会 第 3 回鉄鋼科学セミナーテキスト「鉄鋼における微視的不均一 — 基礎および微細組織と特性への影響 —」, 日本鉄鋼協会, pp. 25-34, 2013.
5. 大谷博司,「状態図計算法の最近の進歩と組織制御への応用」, 日本学術振興会第 133 委員会 50 周年記念誌. 日本学術振興会, , pp.95-100, 2013.
6. 沼倉 宏, ソイシ マオウイア, 陳 迎, “鉄中の硼素 — 第一原理計算による理解” , 日本学術振興会 合金状態図第 172 委員会研究報告書, pp. 21-29, 2013.
7. 古原 忠, “ISSS2012 概要” , 第 3 回鉄鋼科学セミナー「鉄鋼における微視的不均一 — 基礎および微細組織と特性への影響」 , pp. 1-8, 日本鉄鋼協会, (2013).
8. 沼倉 宏, “溶質原子間相互作用の実験と理論” , 第 3 回鉄鋼科学セミナー「鉄鋼における微視的不均一 — 基礎および微細組織と特性への影響」 , pp. 25-34, 日本鉄鋼協会, 2013.
9. 古原 忠, “相変態に由来する材料機能: 結晶構造変化の利得” , 日本金属学会 関東支部講習会「相変態と材料技術—材料エンジニアリングの基礎—」, p. 1-5, 2013.
10. 古原 忠, 宮本吾郎, 紙川尚也, “ナノ析出組織による鉄鋼材料の高強度化” , 塑性と加工, Vol. 54, No. 633, pp. 873-876, 2013.
11. 大村孝仁, “ナノインデンテーション法による局所力学挙動解析” , 軽金属, Vol. 63, No. 2, pp. 65-72, 2013.
12. 大村孝仁, “局所力学挙動解析による機械的特性の評価技術 — ナノスケールから変形機構の素過程に迫る —” , 塑性と加工, Vol. 54, No. 633, pp. 886-890, 2013.
13. 大村孝仁, “ナノインデンテーションと関連技術への期待” , 精密工学会誌, Vol. 79, No. 12, pp. 1181-1184, 2013.
14. 大谷 博司, “Fe-C, Fe-N, Fe-B 系の熱力学: 最新理論で捉え直す” , 「鉄鋼中の軽元素 — 溶質-溶質および溶質-欠陥相互作用の基礎と新展開」 , 日本鉄鋼協会, pp.3-7, 2014.
15. 沼倉 宏, “固溶 C, N と合金元素の相互作用: 最近の進展” , 「鉄鋼中の軽元素 — 溶質-溶質および溶質-欠陥相互作用の基礎と新展開」 , pp. 27-30, 日本鉄鋼協会, 2014.
16. 古原 忠, “C, N と合金元素のナノクラスタ形成: 微細組織と力学特性” , 「鉄鋼中の軽元素 — 溶質-溶質および溶質-欠陥相互作用の基礎と新展開」 , pp. 9-13, 日本鉄鋼協会, 2014.

17. Numakura H., "Defects in metals", in D. E. Laughlin & K. Hono (eds.), *Physical Metallurgy*, fifth edition, pp. 561-637, 2014.
18. 沼倉 宏, "35.1 拡散係数", 第5版 鉄鋼便覧 第3巻 材料の組織と特性 第35節 データベース, 2014.
19. 沼倉 宏, "拡散の原子論", 金属学会セミナー「材料における拡散—基礎および鉄鋼材料における拡散と関連現象」, pp. 1-8, 2014.
20. 沼倉 宏, "鉄中の自己拡散と溶質原子の拡散", 金属学会セミナー「材料における拡散—基礎および鉄鋼材料における拡散と関連現象」, pp. 31-36, 2014.
21. 古原 忠 「鉄の事典」, 朝倉書店, (分担執筆, 9.2.2 「鉄鋼の相変態と材料特性」, pp. 300-306, 14.1 「全体の性質を変える: 熱処理」, pp. 649-652), 2014.
22. 古原 忠 鉄鋼便覧第5版, 日本鉄鋼協会, 第3巻材料の組織と特性 第2編 10・5 「析出」, pp. 122-124, 2014.
23. 古原 忠 「自動車の軽量化テクノロジー」, (株)エヌ・ティー・エヌ, 分担執筆, 第3章第1節, 第1項「ナノ炭化物による鍛造用鋼高強度化技術」pp. 199-205, 2014.
24. 古原 忠: 「加工熱処理の金属学」, 素形材, Vol. 55, No. 8, pp. 2-9, 2014.
25. 大村孝仁 「局所力学挙動と材料特性」, まてりあ, vol. 53, No. 7, pp. 312-320, 2014. 【論文賞受賞決定 2015年9月】
26. 丸川健三郎, 大村孝仁 「転位論・強化機構」, 鉄と鋼, Vol. 100, No. 9, pp. 1076-1088, 2014.
27. 紙川尚也, 宮本吾郎, 古原 忠, "ナノ析出を利用した鉄鋼材料の高強度化と高延性化", まてりあ, vol.54, No 1, pp. 3-11, 2015.
28. 宮本吾郎, 鉄鋼材料の相変態における結晶学と元素分配, ふえらむ, 20巻, 4号, pp. 145-148, 2015.
29. 古原 忠 「相変態を利用した複相鋼の組織制御」, 熱処理, 55巻, 2号, pp. 154-159, 2015.
30. 古原 忠, 宮本吾郎 「鉄鋼の浸窒・窒化組織と特性」, 熱処理, 55巻, 3号, pp. 264-270, 2015.
31. 関戸信彰, 大村孝仁, 鈴木拓哉, 津崎兼彰, 沼倉 宏, "鉄の塑性変形開始挙動に及ぼす固溶元素の影響", 「鉄鋼中の軽元素 — 解明すべき課題」, pp. 8-11, 日本鉄鋼協会, 2015.
32. 古原 忠, Y.-J. Zhang, 宮本吾郎, "焼もどしマルテンサイトでの析出におよぼす合金元素の影響", 「鉄鋼中の軽元素 — 解明すべき課題」, pp. 12-14, 日本鉄鋼協会, 2015.
33. 大塚秀幸, 津崎兼彰, 佐原亮二, 土谷浩一, 中村照美, 北澤英明, "鉄中の炭素および窒素の存在状態と軸比に関する理論計算", 「鉄鋼中の軽元素 — 解明すべき課題」, pp. 15-16, 日本鉄鋼協会, 2015.
34. ソイシ マオウイア, 沼倉 宏, 陳 迎, マーセル H. F. スライター, "α鉄中の固溶C, N原子と置換型溶質原子の相互作用", 「鉄鋼中の軽元素 — 解明すべき課題」, pp. 17-19, 日本鉄鋼協会, 2015.
35. 榎木勝徳, 大谷博司, "クラスター展開法とクラスター変分法によるi-s溶質原子の挙動の理論的研究", 「鉄鋼中の軽元素 — 解明すべき課題」, pp. 20-21, 日本鉄鋼協会, 2015.
36. 宮本吾郎, 古原 忠, 「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 基礎編 2.3(12頁), 応用編 Mo 15.2.2 - 15.2.4(4頁)), 2015.
37. 大谷博司, 「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 基礎編 1.2.7(3.5頁), 応用編 Nb 17.2.1(4頁), Ti 30.2.1(5.5頁), V 32.2.1, 32.2.2 b., c.(4頁)), 2015.
38. 津崎兼彰, 辻伸泰, 三浦博己, 「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 基礎編 3.1.2(5頁)), 2015.

39. 小林 覚, 津崎兼彰, 「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 応用編 A1 2.2.3, 2.2.4(4 頁)), 2015.
40. 大沼郁雄, 沼倉 宏, 「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 応用編 C 6.2.1(10 頁)), 2015.
41. 中田伸生, 宮本吾郎, 梅本 実「鉄鋼材料と合金元素」, 日本鉄鋼協会, (分担執筆, 応用編 C 6.2.2(8 頁)), 2015.
42. 沼倉 宏, “鉄中の B, C, N の挙動 - 取り組むべき課題”, 「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, pp. 6-7, 日本鉄鋼協会, 2016.
43. 榎木勝憲, 大谷博司, “クラスター展開法を用いた鉄中の合金元素と侵入型元素間の相互作用の評価”, 「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, pp. 8-13, 日本鉄鋼協会, 2016.
44. 宮本吾郎, 古原 忠, “相変態に伴うオーステナイトへの炭素濃化”, 「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, pp. 14-18, 日本鉄鋼協会, 2016.

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 21 件、国際会議 38 件)

<国内>

1. 沼倉 宏(大阪府立大学), 「鉄中の溶質原子間相互作用 — 元素戦略の基礎研究 —」, 日本学術振興会 耐熱金属材料第123委員会 第22回討論会「耐熱鋼の基礎・応用および現状・将来」, 東京, 2012.11.12.
2. 古原 忠 (東北大学), “鋼の強化機構と実用材料への応用”, 日本塑性加工学会東関東支部特別講演会, JFE スチール, 2013.4.19.
3. 津崎兼彰(九州大学), “微細伸長粒組織をもった 1200MPa 級 Cr-Mo 鋼の P 添加による高靱性化 Delamination toughening の活用”, 第 293 回材料科学談話会、九州大学筑紫キャンパス、2013.6.21
4. 古原 忠 (東北大学), “元素のクラスタリングを利用した鉄鋼の高強度化”, 京都大学構造材料元素戦略研究拠点平成 25 年度 第 2 回シンポジウム, 京都大学楽友会館, 2013. 7. 9.
5. 大谷博司 (東北大学), “電子論に基づく熱力学物性値の状態図計算への応用”, 日本金属学会秋期講演大会、金沢大学、2013.9.17.
6. 古原 忠 (東北大学), “鉄鋼におけるバルクおよび表面の高強度化設計原理”, 第 11 回表面改質技術研究会, 日本工業倶楽部, 2013.11.15.
7. 古原 忠 (東北大学), “鉄鋼材料における異相界面研究の現状”, 日本鉄鋼協会 「鉄鋼材料の結晶界面物性とその制御」自主フォーラム研究会, エッサム神田、2013.11.19
8. 津崎兼彰(九州大学), “構造材料の新たなフロンティア: 壁を超える微視組織と材料特性”, 第 57 回日本学術会議材料工学連合講演会、京都テルサ、京都市、2013.11.25
9. 大村孝仁(物質・材料研究機構), “局所力学特性評価による粒界近傍の変形挙動解析”, 日本鉄鋼協会自主フォーラム「鉄鋼材料の結晶界面物性とその制御」、東京工業大学、2013.1.17
10. 大谷博司 (東北大学), “材料の熱力学物性の電子論計算と材料開発への応用”, 日本金属学会春期講演大会、東京工業大学、2014.3.21
11. 大谷 博司(東北大学), “Fe-C, Fe-N, Fe-B 系の熱力学: 最新理論で捉え直す”, 日本鉄鋼協会 材料の組織と特性部会 鉄鋼における i-s 相互作用とナノクラスタ形成フォーラムシンポジウム「鉄鋼中の軽元素 — 溶質-欠陥相互作用の基礎と新展開」、東京工業大学、2014.3.23
12. 古原 忠 (東北大学), “鉄鋼材料における異相界面研究の現状”, 「鉄鋼材料に

おける結晶界面研究の現状理解」第 167 回日本鉄鋼協会春季講演大会, 東京工業大学, 2014.3.23.

13. 大村孝仁, 張鈴, 鈴木拓哉, 関戸信彰, 津崎兼彰(物質・材料研究機構、九州大学), ”固溶元素と転位の相互作用”, 日本金属学会春期講演大会、東京工業大学、2014.3.23
14. 古原 忠, 宮本吾郎(東北大学), “鉄鋼の浸窒・窒化組織と特性”, 日本熱処理技術協会 第 77 回春季講演大会, 東京, 2014.6.2
15. 大塚秀幸(物質・材料研究機構), 「BCC-Fe の軸比の第一原理計算」、日本鉄鋼協会フォーラム「鉄鋼中の軽元素の挙動と力学特性の基礎」フォーラム、大阪府立大学なんばセンター「I-site なんば」, 2014.7.25.
16. 大村孝仁(物質・材料研究機構), 「TEM 内その場変形による転位挙動-力学応答の解析」, 日本金属学会/日本鉄鋼協会 九州支部 秋季講演会, 2014.10.17, 熊本大学
17. 津崎兼彰(九州大学)、元素戦略で拓く先進構造材料:マイクロ組織制御と材料特性フロンティア、日本学術振興会第 181 委員会、千里ライフサイエンスセンター(大阪府豊中市)、2014.10.27
18. 古原 忠(東北大学), “相変態・熱処理に関する最近の話題”, 日本熱処理技術協会 第78回秋季講演大会, 鹿児島, 2014.11.27
19. 大谷博司(東北大学), “材料の熱力学物性の電子論計算と状態図計算への応用”, 日本鉄鋼協会北陸信越支部・日本金属学会北陸信越支部共催本多光太郎記念講演, 新潟工科大学, 2014.12.6.
20. 大村孝仁(物質・材料研究機構), 「インデンテーションの TEM その場観察」, 日本鉄鋼協会 第 4 回鉄鋼科学セミナー, 東京, 2015. 8.31.
21. 沼倉 宏(大阪府立大学), “鉄における溶質原子間の相互作用 — 現状と課題”, 日本物理学会 第 25 回格子欠陥フォーラム「材料の強化と劣化のサイエンス」, 大阪大学豊中キャンパス, 2015.9.15.

<国際>

1. Tadashi Furuhashi and Goro Miyamoto (東北大学), “Nano-scale Analysis of Precipitation in Nitrided Steels”, The Symposium on Approaches for Investigating Phase Transformations at the Atomic Scale, TMS Annual Meeting & Exhibition 2011, San Diego, CA, 2011.2.18.
2. H. Numakura (大阪府立大学), “Interaction between interstitial and substitutional solute atoms in iron”, The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), Kyoto, 2012. 5.28.
3. Hiroshi Ohtani (東北大学), “Thermodynamic study on grain-boundary segregation of boron in iron”, The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), Kyoto, 2012. 5.28.
4. G. Miyamoto, T. Furuhashi (東北大学), “Formation of nano-sized cluster and nitride during nitriding of ferrous alloys”, The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), Kyoto, 2012. 5.28.
5. T. Furuhashi, G. Miyamoto and N. Kamikawa (東北大学), “Strengthening of Low Alloy Steels by Interphase Precipitation of Alloy Carbide”, International Union of Materials Research Society International Conference in Asia (IUMRS-ICA), Busan, Korea, 2012. 8.27.
6. Takahito Ohmura (物質・材料研究機構), “Advanced Techniques of Microstructural and Mechanical Characterization in Nano-scale for Structural Materials”, TNU-NIMS Workshop, Taipei, Taiwan, 2013.1.9
7. Tadashi Furuhashi and Goro Miyamoto (東北大学), “Variant Selection in Heterogeneous Nucleation during Phase Transformations of Steels”, 2013 TMS Annual Meeting & Exhibition, San Antonio, USA, 2013.3.7.

8. Takahito Ohmura (物質・材料研究機構), "Nanoindentation-induced deformation behavior of metals", 1st Workshop of Science and Technology of Materials Science, Gyeongsan, Korea, 2013.5.9
9. Takahito Ohmura (物質・材料研究機構), "Nano-scale Deformation Behavior of Metals Associated with Various Lattice Defects", 2013 International Workshop on Advancing Materials Performance from the Nanoscale, Xi'an, China, 2013.6.12
10. *Kaneaki Tsuzaki (九州大学), "Stronger, Tougher Steels: Potential of Nano-Structured Steels", Gordon Research Conference, Physical Metallurgy, University of New England, Maine, USA, 2013.6.28.
11. Kaneaki Tsuzaki (九州大学), "Stronger, Tougher Steels: Potential of Nano-structured Steels", 2013 Physical Metallurgy Gordon Research Conference: Materials at Extremes, Biddeford, Maine, USA, 2013.7.28.
12. Goro Miyamoto, Tadashi Furuahara (東北大学), "Surface Hardening in Nitrided Ferrous Alloys by Nano-sized Clustering and Precipitation", PRICM-8, Waikoloa, Hawaii, 2013.8.8
13. Goro Miyamoto, Tadashi Furuahara (東北大学), "Surface Hardening in Nitrided Ferrous Alloys by Nano-sized Clustering and Precipitation", 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Hawaii, USA, 2013.8.8
14. Goro Miyamoto, Naoya Kamikawa, Tadashi Furuahara (東北大学), "Nano-Sized Interphase Precipitation of VC in Medium and Low Carbon Steels", International Conference on Ultrafine Grained and Nano-Structured Materials, Tehran, Iran, 2013.11.6.
15. Goro Miyamoto, Tadashi Furuahara (東北大学), "Nano-particles to substitute critical elements in steel", Materials in a Resource-Constrained World, Delft, Netherlands, 2013.11.20.
16. Tadashi Furuahara, Goro Miyamoto (東北大学), "Variant selection of martensite and bainite in steels", International Conference on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (Thermec '2013), Las Vegas, NV, U. S. A., 2013.12.3.
17. Tadashi Furuahara (東北大学): "Pattern formation in pearlite structure: a view from ferrite crystallography", TMS symposium on Length Scaling of Lamellar and Patterned Microstructures During Solid-Solid Phase Transformations and Solidification, San Diego, U. S. A., 2014.2.16.
18. Goro Miyamoto, Zhenqing Liu, Naoki Takayama, Tadashi Furuahara (東北大学), "Carbon Enrichment in Austenite during Ferrite Transformation and Austenite Reversion", TMS2014, San Diego, USA, 2014.2.16.
19. H. Ohtani (東北大学): "Re-examination of Thermodynamic Properties of Cementite Using CVM Calculations", TMS2014, 143rd Annual Meeting & Exhibition, San Diego, USA, 2014.2.17
20. *Numakura Hiroshi, "Solute-solute interaction in iron: thermodynamic and kinetic aspects", The 10th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2014), Paris, France, 2014.6.26.
21. T. Furuahara, Y. Xia, and G. Miyamoto (東北大学), "Incomplete bainite transformation in microalloyed low carbon steels", Int. Conf. Martensite Transformation 2014, Bilbao, Spain, 2014.7.8.
22. *K. Tsuzaki (九州大学), "Strong and Tough Fail-safe Steel with Ultra-Fine Elongated Grain Structure", 35th Risoe International Symposium on Materials Science, Technical University of Denmark, 2014.9.4.
23. Numakura Hiroshi (大阪府立大学), "Solute-solute interaction in α iron" (keynote lecture), The 17th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy (ICIFMS-17), Hefei, China, 2014.9.22.

24. T. Furuhashi (東北大学), "Strengthening of low alloy steel by nanoscale precipitation of alloy carbide/nitride", IUMRS-ICYRAM2014, Haikou, China, 2014.10.26.
25. T. Ohmura (物質・材料研究機構), "Dislocation motion and mechanical behavior of bcc metals investigated through TEM in-situ deformation", KIM-JIM Symposium, 2014. 10, Kangwon, Korea
26. T. Ohmura (物質・材料研究機構), "Advanced nano-mechanical characterization of metals for better performance in structural materials", The 3rd International Symposium on Hybrid Materials and Processing, 2014. 11, Busan, Korea
27. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Dislocation motion and related nano-mechanical behavior of bcc iron", The 4th International Symposium on Steel Science, 2014. 11, Kyoto, Japan
28. T. Ohmura (物質・材料研究機構), "Nano-mechanical behavior and dislocation motion of bcc metals", ITRI Symposium, Hsinchu, Taiwan, 2014. 11.
29. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Advanced Nano-mechanical Characterization of BCC Irons for Better Performance in Structural Materials", The 3rd International Doctoral Student Symposium on Material Science, Sapporo, 2015. 2.
30. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Nano-mechanical Testing in Various Conditions for Further Understanding of Materials", TMS2015, Orland, Florida, USA, 2015, 3.
31. K. Tsuzaki (九州大学), "CREST Steel Project on Element Strategy in Japan", NU-NIMS Workshop, Northwestern University, 2015.3.25
32. *Tadashi Furuhashi, Naoya Kamikawa, Goro Miyamoto (東北大学, 弘前大学), "Importance of phase transformations in development of modern high strength steels", Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM2015), Whistler, Canada, 2015.6.29.
33. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Nano-mechanical testing and characterization of dislocation motion in bcc metals", International Workshop on Materials Behavior at the Micro- and Nano-Scale, 2015. 6, Xi'an, China
34. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Advanced Nano-mechanical Characterization of BCC Irons for Better Performance in Structural Materials", Chongqing University Seminar, 2015. 6, Chongqing, China
35. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Advanced Nano-mechanical Characterization of BCC Irons for Better Performance in Structural Materials", 2015 NIMS-NTU Joint Workshop, 2015. 9, Taiwan
36. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido (物質・材料研究機構), "Advanced Nano-mechanical Characterization of BCC Irons for Better Performance in Structural Materials", Technical University Delft Seminar, 2015. 9, Delft, Netherland.
37. Tadashi Furuhashi (東北大学), "Strengthening of low alloy steel by nanoscale precipitation of alloy carbide/nitride", 14th International Union of Materials Research Societies-International Conference on Advanced Materials (IUMRS2015), Jeju, Korea, 2015.10.26.
38. G. Miyamoto, T. Furuhashi (東北大学), "Carbon enrichment in austenite during ferrite and bainite transformations in Fe-Mn-C based alloys", TMS2016, Nashville(USA), 2016.2.14-18.

② 口頭発表 (国内会議 77 件、国際会議 26 件)

1. 発表者(所属)、タイトル、学会名、場所、月日

<国内>

1. 高山直樹、宮本吾郎、古原忠 (東北大学)、“ベイナイト変態停留時の未変態オーステナイトへの炭素の濃化挙動”、日本鉄鋼協会 第 161 回春季講演大会、大阪大学、2011.9.21.
2. 古原 忠、宮本吾郎、紙川尚也 (東北大学)、“低合金鋼における合金炭窒化物のナノ析出組織”、日本鉄鋼協会 第 161 回春季講演大会、大阪大学、2011.9.22.
3. 佐藤健介 紙川尚也、宮本吾郎、古原忠 (東北大学)、“相界面析出組織を有する V 添加低炭素鋼の引張変形挙動”、日本鉄鋼協会 第 162 回秋季講演大会、大阪大学、2011.9.22.
4. 中野克哉、関戸薫子、大村孝仁、沼倉宏、津崎兼彰 (物質・材料研究機構、大阪府立大学)、“Fe-C 二元系合金における塑性変形開始挙動の解析”、日本金属学会 2011 年度秋期講演大会、沖縄コンベンションセンター、2011.11.7.
5. 宮本吾郎 (東北大学)、“窒化中のナノ析出を利用した鉄合金の表面硬化”、日本鉄鋼協会 第 162 回秋季講演大会、横浜国立大学、2012.3.29.
6. 中野克哉、大村孝仁、関戸信彰、関戸薫子、沼倉宏、津崎兼彰 (物質・材料研究機構、大阪府立大学)、“Fe-C 二元系合金における塑性変形開始挙動に及ぼす炭素の影響”、日本鉄鋼協会 第 163 回春季講演大会、横浜国立大学、2012.3.29.
7. 高山直樹、宮本吾郎、古原忠 (東北大学)、“フェライト/ベイナイト変態に伴うオーステナイトへの炭素濃化挙動”、日本鉄鋼協会 第 162 回秋季講演大会、横浜国立大学、2012.3.30.
8. 中野克哉、大村孝仁、関戸信彰、関戸薫子、沼倉宏、津崎兼彰 (物質・材料研究機構、大阪府立大学)、“Fe-C 合金における塑性変形開始挙動に及ぼす微量炭素の影響”、NIMS CONFERENCE 2012、つくば、2012.6.6.
9. 宮本吾郎、新房邦夫、古原忠、(東北大学) “アトムプローブを用いた Fe-C 2 元合金の炭素濃度の定量測定について”、日本鉄鋼協会 第 163 回秋季講演大会、愛媛大学、2012.9.15.
10. 飯久保 智、Marcel Sluiter、大谷博司 (九州工業大学、デルフト工科大学、東北大学)、クラスター変分法を用いた侵入型固溶体の自由エネルギー計算、日本金属学会第 151 回秋期大会、愛媛大学、2012.9.17-19.
11. 池田知弘、飯久保 智、大谷博司(東北大学、九州工業大学)、”電子論計算を用いた Fe-C2元系状態図の再検討”、日本金属学会第 151 回秋期大会、愛媛大学、2012.9.17-19.
12. 平松靖也、田中友己、沼倉 宏 (大阪府立大学)、“ α 鉄中の炭素原子とクロム原子の相互作用”、日本鉄鋼協会第 164 回秋季講演大会、愛媛大学、2012.9.17.
13. 沼倉 宏、本田研二郎、平松靖也 (大阪府立大学)、“ α 鉄における窒素原子とマンガン原子の相互作用”、日本鉄鋼協会第 164 回秋季講演大会、愛媛大学、2012.9.17.
14. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学、東北大学)、“Light elements dissolved in alpha-iron: A density functional theory study”、日本金属学会第 151 回秋期講演大会、愛媛大学、2012.9.18.
15. 中野克哉、大村孝仁、関戸信彰、関戸薫子、沼倉宏、津崎兼彰 (物質・材料研究機構、大阪府立大学)、“Fe-C 二元系合金の局所力学特性に及ぼす微量固溶炭素の影響”、日本鉄鋼協会 第 164 回秋季講演大会、愛媛大学、2012.9.
16. 沼倉 宏、ソイシ マオウイア、陳 迎、(大阪府立大学、東北大学) “鉄中の軽元素 — 第一原理計算による研究”、日本学術振興会 合金状態図第 172 委

- 員会 第 24 回研究会, 物質・材料研究機構, 2012.10.29.
17. ソイシ マオウイア, 陳 迎, 沼倉 宏 (大阪府立大学, 東北大学), “Theoretical study of light elements dissolved in bcc iron”, 日本学術振興会 材料の微細組織と機能性 第 133 委員会 第 216 回研究会, 東京理科大学, 2013.1.25.
 18. Zhenqing Liu, Goro Miyamoto, Tadashi Furuvara (東北大学), “Carbon enrichment during ferrite transformation in Fe–2Mn–C alloy”, 日本鉄鋼協会 第 164 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.27.
 19. Zhenqing Liu, Goro Miyamoto, Tadashi Furuvara, (東北大学) “Reverse transformation of austenite from martensite in Fe–Mn–C alloys during intercritical annealing”, 日本鉄鋼協会 第 164 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.27.
 20. 中野克哉, 大村孝仁, 関戸信彰, 関戸薫子, 沼倉宏, 津崎兼彰 (物質・材料研究機構, 大阪府立大学), “Fe–C 二元系合金の局所力学挙動に及ぼす固溶炭素の影響”, 日本金属学会 第 152 回春季講演大会, 東京理科大学, 2013.3.27.
 21. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学, 東北大学), “First-principles study of dilute solution of boron in alpha iron”, 日本金属学会第 152 回春季講演大会, 東京理科大学, 2013.3.28.
 22. G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuvara, S. Suetsugu (東北大学), “Nitriding behaviors of Fe–M₁–M₂ ternary alloys”, 日本鉄鋼協会 第 164 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.28.
 23. Y. -J. Zhang, G. Miyamoto, T. Furuvara (東北大学), “EBSD and 3DAP Analysis on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steel”, 日本鉄鋼協会 第 164 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.28.
 24. 沼倉 宏, Souissi M., 陳 迎 (大阪府立大学, 東北大学), “鉄中の硼素 — 第一原理計算による理解”, 日本学術振興会 合金状態図 第 172 委員会 第 25 回研究会, 東京工業大学, 2013.4.22.
 25. 張咏杰, 宮本吾郎, 古原忠, 大村孝仁, 鈴木拓哉, 津崎兼彰 (東北大学, 物質・材料研究機構), “3DAP and nano-indentation analysis on VC interphase precipitation in low carbon steels”, 日本鉄鋼協会第 166 回秋季講演大会, 金沢大学, 2013.9.17.
 26. Y. -J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuvara, T. Ohmura, T. Suzuki, K. Tsuzaki, (東北大学, 物質・材料研究機構) “3DAP and nano-indentation analysis on VC interphase precipitation in low carbon steels”, 日本鉄鋼協会 第 165 回秋季講演大会, 金沢大学, 2013.9.19.
 27. 飯久保智, Marcel Sluiter, 大谷博司 (東北大学, 九州工業大学, デルフト工科大学), “クラスター変分法を用いた Fe–Cr–N 3 元系の自由エネルギー計算”, 日本金属学会秋期講演大会, 金沢大学, 2013.9.18.
 28. 津崎兼彰, 木村勇次, Meysam JAFARI (物質・材料研究機構), “微細伸長粒組織を持った 1200MPa 級 Cr–Mo 鋼の Pte 添加による高靱性化”, M&M2013 材料力学カンファレンス, 鹿児島大学, 2013.10.14.
 29. 張咏杰, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “低炭素鋼における VC 相界面析出に及ぼす α/γ 結晶方位関係の影響”, 日本熱処理技術協会第 76 回秋季講演大会, 名城大学, 2013.11.28.
 30. 小林大介, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “中炭素鋼のプラズマ窒化挙動に及ぼす添加元素の影響”, 日本熱処理技術協会第 76 回秋季講演大会, 名城大学, 2013.11.28.
 31. 張咏杰, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “低炭素鋼の VC 相界面析出に及ぼす α/γ 結晶方位関係の影響”, 第 12 回日本金属学会東北支部研究発表大会, 名取市文化会館 小ホール, 2014.1.13.

32. 大塚秀幸、DINH VanAn、大野隆央、津崎兼彰、土谷浩一、佐原亮二、北澤英明、中村照美(物質・材料研究機構)、“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”、共用・計測 合同シンポジウム 2014、NIMS、つくば、2014.3.14.
33. 佐伯成駿、飯久保智、榎木勝徳、大谷博司(東北大学、九州工業大学)、“電子論に基づく熱力学量を用いた Fe-Cr-C3元系状態図の解析” 日本金属学会第156回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.20.
34. 佐伯成駿、飯久保智、大谷博司(東北大学、九州工業大学)、“クラスター変分法を用いた Fe-(Ti,V)-C 3元系の自由エネルギー計算”、日本金属学会春期講演大会、東京工業大学、2014.3.21
35. 平松靖也、沼倉 宏(大阪府立大学)、“ α 鉄中の炭素原子と3d遷移金属元素の原子間相互作用”、日本鉄鋼協会第167回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.21.
36. 渡辺裕介、沼倉 宏、M. Souissi(大阪府立大学)、“ α 鉄中のC-(Al, Si)、N-(Al, Si)の原子間相互作用”、日本鉄鋼協会第167回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.21.
37. Souissi Maaouia, Chen Ying, Numakura Hiroshi(大阪府立大学、東北大学)、“Site preference and migration energy of B, C, N, and O in alpha iron: First-principles calculations with corrections for elastic interaction”、日本金属学会2014年春期講演大会(第154回)、東京工業大学、2014.3.21.
38. Y.-J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, T. Ohmura, T. Suzuki, K. Tsuzuki(東北大学、物質・材料研究機構)、“Effects of Mn, Si and N contents on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steels”、日本鉄鋼協会第167回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.22.
39. 古原忠、夏 苑、宮本吾郎(東北大学)、“Mo添加低炭素鋼におけるベイナイトの不完全変態”、日本鉄鋼協会第167回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.22.
40. 宮本吾郎、劉振清、古原忠(東北大学)、“二相域焼鈍における γ 逆変態に伴う炭素濃化”、日本鉄鋼協会第167回春期講演大会、東京工業大学、2014.3.22.
41. 紙川尚也、近 英佑、古原 忠(東北大学)、“ナノ析出鋼における変形応力の温度・ひずみ速度依存性”、日本鉄鋼協会第168回秋季講演大会、名古屋大学、2014.9.24.
42. Souissi Maaouia, Chen Ying, Numakura Hiroshi(大阪府立大学、東北大学)、“Behavior of C and N in vicinity of Cr in alpha iron: first principles study”、日本鉄鋼協会第168回秋季講演大会、名古屋大学、2014.9.25..
43. 大塚秀幸、V. A. Dinh、佐原亮二、津崎兼彰、中村照美、土谷浩一、北澤英明、佐藤和則、掛下知行(物質・材料研究機構、大阪大学)、“鉄鋼材料の物性に及ぼす置換型元素の影響の第一原理計算”、日本鉄鋼協会2014年秋季講演大会、名古屋大学、2014.9.25.
44. 佐伯成駿、道中和樹、飯久保 智、大谷博司(東北大学、九州工業大学)、“セメンタイトの熱力学的安定性に及ぼす合金元素の効果”、日本金属学会第155回秋期講演大会、名古屋大学、2014.9.26.
45. Souissi Maaouia, Chen Ying, Numakura Hiroshi(大阪府立大学、東北大学)、“First principles calculations of elastic properties of Fe-C and Fe-N martensites”、日本鉄鋼協会第168回秋季講演大会、名古屋大学、2014.9.26.
46. 関戸信彰、大村孝仁、津崎兼彰(物質・材料研究機構、九州大学)、“FCC純金属のナノインデンテーション挙動”、日本金属学会秋期講演大会、名古屋大学、2014.9.26.
47. 孟凡輝、宮本吾郎、古原忠(日立建機、東北大学)、“Fe-M2元合金の窒化挙動に及ぼす強加工の影響”、日本鉄鋼協会第168回秋季講演大会、名古屋大学、2014.9.26.

48. 久保寛典,田頭聡、宮本吾郎、古原忠 (日新製鋼、東北大学), Fe-1mass%M2元合金の浸窒焼入れ組織と硬さ, 第13回日本金属学会東北支部研究発表大会, 岩手大学, 2014.12.10.
49. 目黒奨、木村隆、中村照美、邱海、川田哲、西尾満章、津崎 兼彰 (物質・材料研究機構)、“極微量 B の機器分析用標準試料の創製と検量線の作成”、第44回表面分析研究会、航空会館、2015.2.26.
50. 赤田 愛, Souissi Maaouia, 沼倉 宏, Marcel H. F. Sluiter (大阪府立大学, デルフト工科大学)、“ α 鉄中の Al-N の原子間相互作用”, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京大学, 2015.3.18.
51. 久保寛典,宮本吾郎、古原忠 (日新製鋼、東北大学), 浸窒焼入れ組織におよぼす合金元素の影響, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京大学, 2015.3.18.
52. 大塚秀幸 (物質・材料研究機構)、“鉄鋼材料の組織制御と第一原理計算による元素機能の解明”、日本鉄鋼協会 2015 年春季講演大会、東京大学、2015.3.18.
53. Zhang Yongjie、宮本吾郎、新房邦夫、古原忠 (東北大学), Dominating factors on the dispersion of VC interphase precipitation in V-added steels, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京大学, 2015.3.19.
54. 紙川尚也、佐藤 悠、Elango Chandiran、古原 忠 (東北大学), フェライト中にナノ析出物を分散させた DP 鋼の引張変形挙動とひずみ分配, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京大学, 2015.3.19.
55. 吉田啓太, 村田純教, 塚田祐貴, 小山敏幸, 沼倉 宏, Souissi Maaouia (名古屋大学, 名古屋工業大学, 大阪府立大学), 正方晶弾性率を考慮したラスマルテンサイト相のフェーズフィールドシミュレーション, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京大学, 2015.3.19.
56. 中村照美、邱海、目黒奨、津崎兼彰 (物質・材料研究機構)、“B 添加 Al-Si 耐候性鋼の溶接継ぎ手ボンド部の衝撃靱性”、日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会、東京大学、2015.3.20.
57. 小林覚、津崎兼彰、宮本吾郎、古原忠、大谷博司 (物質・材料研究機構, 東北大学)、“B 添加 Al-Si 耐候性鋼ボンド HAZ 部のマイクロ組織形成に及ぼす B の効果”、日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会、東京大学、2015.3.20.
58. 目黒奨、木村隆、中村照美、邱海、小林覚、津崎兼彰 (物質・材料研究機構)、“B 添加 Al-Si 耐候性鋼の実現に向けた微量 B の分析技術”、日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会、東京大学、2015.3.20.
59. Elango Chandiran, Yu Sato, Naoya Kamikawa, Tadashi Furuwara (東北大学, 弘前大学) “Effect of phase distribution on tensile behavior of ferrite-martensite dual phase steels with nano-precipitation”, 日本鉄鋼協会第 171 回秋季講演大会, 九州大学, 2015.9.16.
60. 沼倉 宏, 原 彰人, ソイシ マオウイア (大阪府立大学), “ α 鉄における Cr-N 溶質原子複合体形成”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九州大学, 2015.9.16.
61. 張咏杰, 趙超, 宮本吾郎, 新房邦夫, 古原忠 (東北大学, 北京科学技術大学), “Comparative study on nano-sized VC precipitates by interphase precipitation and tempering of martensite in low carbon steel”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九州大学, 2015.9.17.
62. 佐伯成駿、榎木勝徳、飯久保智、大谷博司 (東北大学)、Fe-Ti-C および Fe-V-C3 元系における相平衡の熱力学的解析、日本金属学会第 157 回秋期講演大会、九州大学、2015.9.18.
63. 榎木勝徳、佐伯成駿、大谷博司 (東北大学)、侵入型元素と置換型元素のクラス

- ター形成に関するモンテカルロシミュレーション、日本金属学会第 157 回秋期講演大会、九州大学、2015.9.18.
64. 関戸信彰(物質・材料研究機構), 大村孝仁(物質・材料研究機構, 九州大学), 鈴木拓哉(九州大学), 津崎兼彰(九州大学, 物質・材料研究機構), 沼倉 宏(大阪府立大学), “鉄の塑性変形開始挙動に及ぼす固溶元素の影響”, 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素—解明すべき課題」, 九州大学, 2015.9.18.
 65. 古原 忠, Y. -J. Zhang, 宮本吾郎(東北大学), 「焼もどしマルテンサイトでの析出におよぼす合金元素の影響」 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素—解明すべき課題」, 九州大学, 2015.9.18.
 66. ソイシ マオウイア, 沼倉 宏, 陳 迎, マーセル H. F. スライター(大阪府立大学, 東北大学, デルフト工科大学), “ α 鉄中の固溶 C, N 原子と置換型溶質原子の相互作用”, 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素—解明すべき課題」, 九州大学, 2015.9.18.
 67. 榎木勝徳、大谷博司(東北大学)、クラスター展開法とクラスター変分法による i-s 溶質原子の挙動の理論的研究、日本鉄鋼協会 材料の組織と特性部会 シンポジウム「鉄鋼中の軽元素—解明すべき課題」、九州大学、2015.9.18.
 68. T. Ohmura (物質・材料研究機構), “Direct observation of dislocation motion and related nano-mechanical behavior in bcc iron”, MS&T 2015, 2015. 10, Columbus, USA
 69. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki, and N. Sekido (物質・材料研究機構), “Advanced nano-mechanical characterization of bcc irons for better performance in structural materials”, INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PLASTICITY 2016, 2016. 1, Hawaii, USA
 70. Elango Chandiran, Naoya Kamikawa, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi (東北大学), “Effect of phase strength on tensile behavior of ferrite martensite dual phase steels with nano-precipitation”, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 東京理科大学, 2016.03.23.
 71. 張咏杰, 宮本吾郎, 新房邦夫, 古原忠(東北大学), “Interphase precipitation behaviors in V-Ti and V-Nb multiple-added low carbon steels”, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 東京理科大学, 2016.03.23.
 72. 沼倉 宏(大阪府立大学), “ α 鉄中の B, C, N の挙動 - 取り組むべき課題”, 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, 東京理科大学, 2016.3.24.
 73. 宮本吾郎、古原忠(東北大学), “相変態に伴うオーステナイトへの炭素濃化”, 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, 東京理科大学, 2016.03.24.
 74. 榎木勝徳、大谷博司(東北大学), 「クラスター展開法を用いた鉄中の合金元素と侵入型元素間の相互作用の評価」, 日本鉄鋼協会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素 - 基礎, 組織形成, 力学特性」, 東京理科大学, 2016.3.24.
 75. M. Souissi (大阪府立大学), Y. Chen (東北大学), M. H. F. Sluiter (デルフト工科大学), H. Numakura (大阪府立大学), “Interaction of interstitial C with substitutional Cr in alpha iron: a first principles study”, 日本金属学会第 158 回春期講演大会, 東京理科大学, 2016.3.24.
 76. 古原忠, Hui-dong Wu, Goro Miyamoto, Zhi-gang YANG, Chi ZHANG(東北大学, 清華大学), “Incomplete bainite transformation in Fe-0.4C-(1.5, 3)Si alloys”, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 東京理科大学, 2016.03.25
 77. 大塚秀幸, V A DINH, 大野隆央, 津崎兼彰, 土谷浩一, 中村照美(大阪府立大学): “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”, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会、東京理科大学, 2016.3.24

<国際>

1. Y. Tanaka, H. Numakura, G. Miyamoto, T. Furuhashi (大阪府立大学、東北大学), “Solute–solute interaction in alpha iron studied by mechanical spectroscopy”, The 16th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy, Lozanne, 2011.7.4.
2. N. Takayama, G. Miyamoto, T. Furuhashi, (東北大学) “Partitioning of carbon into austenite matrix during bainite transformation”, TMS2012, Orlando, 2012.3.13.
3. Tadashi Furuhashi, Toshio Murakami, Goro Miyamoto, Naoya Kamikawa, (東北大学) “Interphase Precipitation of Vanadium Carbide in Low Alloy Steels”, TMS2012, Orlando, 2012.3.14.
4. Satoshi Iikubo, Marcel H.F. Sluiter, and Hiroshi Ohtani (九州工業大学, デルフト工科大学, 東北大学), “Application of the Cluster Variation Method to Interstitial Solid Solutions of Iron Based Alloys”, CALPHADXLI, California, 2012.6.3-8.
5. T. Furuhashi (東北大学), “Alloy Design in Surface Hardening of Steels Based on Element Strategy”, International Union of Materials Research Society International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM2012), Yokohama, 2012.9.27.
6. T. Ohmura, L. Zhang, K. Sekido, K. Tsuzaki (物質・材料研究機構), “Indentation-induced plasticity of metals with various lattice defects”, International Union of Materials Research Society International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM2012), Yokohama, 2012.9.27.
7. Goro Miyamoto, Shinya Abe, Tadashi Furuhashi (東北大学), “In-Situ Characterization of Bainite Transformation by Confocal Laser Scanning Microscopy”, Materials Science & Technology 2012, San Antonio, 2012.10.9.
8. H. Numakura (大阪立大学), “Solute-solute interaction in alpha iron – Theory and experiment”, PRICM-8, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
9. Meysam Jafari, Kaneaki Tsuzaki (物質・材料研究機構), “Toughening by adding embrittler phosphorous to a high strength steel with ultrafine elongated grain structure”, PRICM-8, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
10. H. Numakura (大阪府立大学), Solute-solute interaction in alpha iron — theory and experiment, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
11. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi (東北大学), Effects of alpha/gamma Orientation Relationship on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steels, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
12. Meysam Jafari, Kaneaki Tsuzaki (物質・材料研究機構), “Toughening by adding embritter phosphorous to a high strength steel with ultrafine elongated structure, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
13. Tadashi Furuhashi, Naoki Takayama, Goro Miyamoto (東北大学), Partitioning of Carbon into Austenite Matrix during Ferrite and Bainite Transformations in Low-alloy Low-carbon Steel, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.8.
14. Y.-J. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuhashi, T. Ohmura, K. Tsuzaki, T. Suzuki (東北大学, 物質・材料研究機構), Effects of Mn, Si and N on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steels, The 13th workshop of Alloying Element effects on Migrating phase Interfaces, Kyoto, 2014.5.26-27.
15. H. Kubo, G. Miyamoto, T. Furuhashi (日新製鋼、東北大学), Alloying effects on microstructure of Fe-1mass%M binary alloys treated by nitriding and quenching process, The 13th workshop of Alloying Element effects on Migrating phase Interfaces, Kyoto, 2014.5.26-27.

16. G.Miyamoto, T. Furuvara (東北大学), Carbon enrichment in austenite during ferrite and bainite transformations in Fe-Mn-C based alloys, The 13th workshop of Alloying Element effects on Migrating phase Interfaces, Kyoto, 2014.5.26-27.
17. Y. Zhang, G. Miyamoto, K. Shinbo, T. Furuvara, T. Ohmura, K. Tsuzaki, T. Suzuki (東北大学, 物質・材料研究機構), "Effects of Mn, Si and N on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steels", MSE2014, Darmsdat, Germany, 2014 年 9.23-25.
18. Hironori Kubo, Goro Miyamoto, Tadashi Furuvara (日新製鋼、東北大学), "Alloying Effects on Microstructure of Fe-1mass%M Binary Alloys Treated by Nitriding and Quenching Process", Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM2015), Whistler, Canada, 2015.6.29.
19. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Kunio Shinbo, Tadashi Furuvara(東北大学), "Dominating Factor on the Dispersion of VC Interphase Precipitation in V-added Steels", Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials (PTM2015), Whistler, Canada, 2015.7.2.
20. T. Furuvara, G. Miyamoto and N. Kamikawa(東北大学, 弘前大学), "Strengthening of Medium Carbon Forging Steels by Interphase Precipitation", AIST Long&Foging, Colorado, USA, 2015.7.13.
21. T. Ohmura, L. Zhang, T. Suzuki and N. Sekido, Dislocation motion and related nano-mechanical behavior in bcc iron, 17th International Conference on the Strength of Materials (ICSMA 17), 2015. 8, Brno, Czech Republic.
22. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Naoya Kamikawa, Kunio Shinbo, Tadashi Furuvara (東北大学, 弘前大学), "Precipitation Strengthening by VC/NbC/TiC Interphase Precipitation in Low-carbon Steels", ASIA STEEL 2015, Yokohama, 2015.10.7.
23. Elango Chandiran, Yu Sato, Naoya Kamikawa, Tadashi Furuvara (東北大学, 弘前大学), "Effect of phase distribution on tensile behavior of ferrite-martensite dual phase steels with nano-precipitation", ASIA STEEL2015, Yokohama(Japan), 2015.10.8.
24. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Kunio Shinbo, Tadashi Furuvara (東北大学), "Relationship between hardness and ferrite morphology in VC interphase precipitation strengthened low carbon steels", The 10th CSM Steel Congress &The 6th Baosteel Biennial Academic Conference, Shanghai, China, 2015.10.21-23.
25. M. Souissi, H. Numakura(大阪府立大学), "Elastic properties of Fe-C and Fe-N martensites", The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science, Sendai, Japan, 2015.11.2.
26. H. Wu, G. Miyamoto, Z.-G Yang, C Zhang, T. Furuvara (東北大学, 清華大学), "Incomplete bainite transformation in Fe-3Si-0.4C alloy", TMS2016, Nashville(USA), 2016.02.14-18.

③ ポスター発表 (国内会議 20 件、国際会議 20 件)

1. 発表者(所属)、タイトル、学会名、場所、月日

<国内>

1. 劉振清、宮本吾郎、古原忠(東北大学), "The effects of transformation temperature and carbon content on proeutectoid ferrite fraction in Fe-2Mn-C alloys", 日本鉄鋼協会 第 162 回秋季講演大会, 大阪大学, 2011.9.20.
2. Yongjie Zhang、宮本吾郎、古原忠(東北大学), "低炭素鋼の VC 相界面析出に及ぼす Mn、Si 添加の影響", 日本鉄鋼協会 第 163 回秋季講演大会, 愛媛大学, 2012.9.15.
3. 平松靖也(大阪府立大学), "α 鉄における炭素原子と 3d 遷移金属元素の原子間相互作用", 日本鉄鋼協会第 165 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.28.

4. 渡辺裕介 (大阪府立大学), “ α 鉄中における Si-N の相互作用”, 日本鉄鋼協会 第 165 回春季講演大会, 東京電機大学, 2013.3.28.
5. 鈴木拓哉, 関戸信彰, 張鈴, 大村孝仁, “Fe 合金の局所力学挙動に及ぼす添加元素の影響”, 日本金属学会 2013 秋季講演大会, 金沢, 2013.9.17.
6. 小林大介, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “中炭素鋼のプラズマ窒化挙動に及ぼす合金元素複合添加の影響”, 日本鉄鋼協会 第 165 回秋季講演大会, 金沢大学, 2013.9.18.
7. 赤田 愛, 沼倉 宏 (大阪府立大学), “ α 鉄中のリンと炭素およびリンと窒素の原子間相互作用”, 日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会, 東京, 2014.3.22.
8. 金下武士, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), Fe-2Mn-C 合金のオーステナイト粒界から生成したベイナイトのバリエーション選択, 日本鉄鋼協会第 166 回秋季講演大会, 金沢大学, 2013.9.18
9. 大塚秀幸、DINH VanAn、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”、共用・計測 合同シンポジウム 2014、NIMS,つくば、2014.3.14
10. 鈴木拓哉, 関戸信彰, 張鈴, 大村孝仁 (物質・材料研究機構), “Fe 合金の局所力学挙動に及ぼす Ni, Si の影響”, 日本金属学会 2014 春季講演大会, 東京, 2014. 3.21.
11. 佐藤悠, 紙川尚也, 古原 忠 (東北大学), “ナノ析出 DP 鋼の引張特性とひずみ分配”, 日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会, 名古屋, 2014.9.25.
12. 大塚秀幸, 佐原亮二, 津崎兼彰, 土谷浩一, 北澤英明, 中村照美, ” BCC-Fe の軸比に及ぼす炭素の影響の第一原理計算”、 共用・計測 合同シンポジウム 2015、NIMS,つくば、2015.3.10
13. 松岡厚志 (大阪府立大学), “ α 鉄中の炭素とバナジウムの原子間相互作用”, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京, 2015.3.19.
14. 吉田康紀, 金下武士, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “Fe-2Mn-1.5Si-0.3C における二相域焼鈍に伴う組織変化”, 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会, 東京, 2015.3.19.
15. 鈴木拓哉, 関戸信彰, 大村孝仁: Fe 二元系合金の局所領域における塑性変形開始挙動に及ぼす添加元素の影響, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 福岡, 2015.9.1
16. 平田研二 (九州工業大学), “クラスター展開・変分法を用いた Fe-Ti-S3 元系状態図の解析”, 日本金属学会秋期講演大会, 九州大学, 2015.9.16.
17. 建山恭寛, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “Fe-Al-V 合金のプラズマ窒化における表面硬化とナノ窒化物析出”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九大, 2015.9.17.
18. 塚本直樹, 紙川尚也, 古原忠 (東北大学, 弘前大学), “VC ナノ析出強化鋼の引張変形挙動に及ぼす V 添加量の影響”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九大, 2015.9.17
19. H. Wu, 宮本吾郎, 古原忠 (東北大学), “Fe-0.4C-3Si 合金におけるベイナイト不完全変態”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九大, 2015.9.17.
20. 松岡厚志, 沼倉 宏 (大阪府立大学), “ α 鉄中のバナジウムと炭素の原子間相互作用”, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 九州大学, 2015.9.17.

<国際>

1. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学, 東北大学), “Theoretical approach to the nature of light elements dissolved in iron”, The 6th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO), Sendai, 2012.2.10.

2. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学, 東北大学), “First-principles approach to the nature of light elements dissolved in α iron”, The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), Kyoto, 2012.5.28.
3. Tadashi Furuhashi, Kenji Takahashi, Naoki Takayama, Goro Miyamoto, Taishi Fujishiro, Masanori Minagawa (東北大学, 新日鐵住金), “Effects of Mo and B addition on bainite transformation in low-carbon low-alloy steels”, The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012), Kyoto, 2012.5.28.
4. Satoshi Iikubo, Marcel H.F. Sluiter, and Hiroshi Ohtani (九州工業大学, デルフト工科大学, 東北大学), Application of the Cluster Variation Method to Interstitial Solid Solutions of Iron Based Alloys, CALPHAD XI, California, USA, 2012.6.3-8.
5. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学, 東北大学), “Light elements dissolved in α iron: A first-principles study”, The 7th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (ACCMS-VO), Sendai, 2012.11.23.
6. Y.-J. Zhang, G. Miyamoto, T. Furuhashi (東北大学), “3DAP Analysis of VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steel”, the 5th International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials (ISAEM-2012), Toyohashi, 2012.11.6.
7. T. Ohmura, L. Zhang, K. Sekido, K. Tsuzaki (物質・材料研究機構), “Effects of Lattice Defects on Indentation-induced Plasticity Initiation in Metals”, Materials Research Society Fall Meeting, Boston, USA, 2012.11.25-30.
8. K. Sekido, T. Ohmura, K. Tsuzaki (物質・材料研究機構), “Effects of alloying elements on local plasticity initiation at a grain boundary of steel”, International Symposium on Strength of Fine Grained Materials, Tokyo, 2013.7.16-18.
9. Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi (東北大学), “Effects of alpha/gamma Orientation Relationship on VC Interphase Precipitation in Low Carbon Steels”, PRICM-8, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
10. S. Hiramatsu, H. Numakura, Y. Tanaka, T. Tekeuchi (大阪府立大学), “Atomic interaction between carbon and substitutional transition elements in alpha iron”, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
11. Souissi M., Chen Y., Numakura H. (大阪府立大学), “First-principles study of B, C, and N dissolved in alpha iron”, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
12. Y. Watanabe, H. Numakura (大阪府立大学), “Si-C and Si-N interaction in alpha iron”, Waikoloa, Hawaii, USA, 2013.8.6.
13. S. Hiramatsu, H. Numakura, Y. Tanaka, T. Takeuchi (大阪府立大学), “Atomic interaction between carbon and substitutional transition elements in α iron”, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Hawaii, USA, 2013.8.6.
14. Y. Watanabe, H. Numakura (大阪府立大学), “Si-C and Si-N interaction in α iron”, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Hawaii, USA, 2013.8.6.
15. M. Souissi, Y. Chen, H. Numakura (大阪府立大学, 東北大学), First-principles study of B, C, and N dissolved in α iron, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Hawaii, USA, 2013.8.6.
16. T. Suzuki, N. Sekido, L. Zhang, T. Ohmura (物質・材料研究機構): Influence of Si Content on Nano-Scale Deformation Behavior of Fe-Si Binary Alloy, The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), Hawaii, USA, 2013.8.4.
17. Akata Ai, Numakura Hiroshi (大阪府立大学), “Atomic interaction of phosphorus with carbon and nitrogen in iron”, The 17th International Conference on Internal

- Friction and Mechanical Spectroscopy, Hefei, China, 2014.9.22.
18. H. Kubo, G. Miyamoto, T. Furuhashi (日新製鋼, 東北大学), "Alloying Effects on Microstructure of Fe-1mass%M Binary Alloys Treated by Nitriding and Quenching Process", MSE2014, Darmsdat, Germany, 2014.9.23-25.
 19. G. Miyamoto, Z. Liu, Y. Xia, T. Furuhashi (東北大学), "Carbon Enrichment in Austenite during Ferrite and Bainite Transformations in Fe-Mn-C Alloys", MSE2014, Darmsdat Germany, 2014.9.23-25.
 20. N. Kamikawa, M. Hirohashi, Y. Sato, E. Chandiran, G. Miyamoto, T. Furuhashi (弘前大学, 東北大学), "Improvement of strength and ductility in ferrite-martensite dual phase steels by dispersion of nano-precipitates", 4th Int. Symp. Steel Science (ISSS 2014), Kyoto, Japan, 2014.11.3-6.

(4)知財出願

①国内出願 (2件)

1. 「耐候性鋼およびこれを用いた溶接継ぎ手」, 独立行政法人 物質・材料研究機構, 中村照美, 津崎兼彰, 西村俊弥, 邱海, 目黒奨, 2012年10月24日, 特願 2012-234603.
2. 「高靱性耐候性鋼とその溶接継ぎ手」, 大塚秀幸、小林覚、津崎兼彰、中村照美、古原忠、宮本吾郎、国立研究開発法人 物質・材料研究機構、2015年2月27日、特願 2015-038772

②海外出願 (0件)

③その他の知的財産権

(5)受賞・報道等

①受賞

1. *津崎兼彰, 日本金属学会 谷川・ハリス賞, 2012年3月28日
2. 平松靖也, 日本鉄鋼協会 第165回春季講演大会 学生ポスターセッション 努力賞, 2013年3月28日.
3. 中野克哉, 日本鉄鋼協会学生ポスターセッション努力賞、2012年3月29日
4. 中野克哉、NIMS CONFERENCE 2012 Young Scientist Poster Award, 2012年6月6日.
5. *大谷博司, 日本金属学会 谷川・ハリス賞, 2014年3月21日
6. 赤田 愛, 日本鉄鋼協会学生ポスターセッション優秀賞, 2014年3月22日.
7. *金下武士, 日本鉄鋼協会学生ポスターセッション最優秀賞, 2014年3月22日.
8. 村上俊夫, 畑野等, 宮本吾郎, 古原忠, 日本鉄鋼協会澤村論文賞, 2014年3月21日
9. 大塚秀幸、Acta Materialia excellent reviewer (優秀査読者), 2014年6月
10. *古原 忠, 日本金属学会 谷川・ハリス賞, 2015年3月18日
11. 津崎兼彰, 日本鉄鋼協会 学術功績賞, 2015年3月18日
12. 吉田康紀, 日本鉄鋼協会 学生ポスター発表 努力賞、2015年3月19日
13. *津崎兼彰, 本多記念会 本多フロンティア賞, 2014年5月29日
14. 大塚秀幸、日本鉄鋼協会 論文誌 Best reviewer, 2015年4月20日
15. 大塚秀幸、日本鉄鋼協会 学術貢献賞(三島賞), 2015年3月18日
16. 津崎兼彰, 日本金属学会 功労賞, 2015年9月16日
17. 大村孝仁, まてりあ論文賞, 2015年9月16日
18. H. Wu, 日本鉄鋼協会学生ポスターセッション優秀賞, 2015年9月17日
19. 建山恭寛, 日本鉄鋼協会学生ポスターセッション努力賞, 2015年9月17日
20. 大塚秀幸・津崎兼彰、日本鉄鋼協会 俵論文賞、2016年3月23日

②マスコミ(新聞・TV等)報道

1. 古原 忠:「アルミより軽い鉄など新素材開発」, 仙台経済界臨時増刊号「仙台のプロジェクト100」, 2013.
2. 古原 忠:「現代の錬金術師—新材料をつくりだせ!」, Newton 2014年11月号.
3. 古原 忠:「元素戦略/希少金属代替材料開発第9回合同シンポジウム」, Newton 2015年5月号.
4. 古原 忠:「新しい鉄をデザイン」, 別冊ニュートンムック「マテリアル革命」, 2015年11月.

③その他

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

②社会還元的な展開活動

- HPCI 戦略プログラムにおける計算材料科学戦略拠点 (CMRI) において、構造材料の元素戦略における実験・計算の連携に関する講演および討議を行っている。
以下に古原が話題提供を行った研究会等を挙げる。
 - 2011年10月4日 CMSI 元素戦略 WG「構造材料の部」実験連携検討会 (東京大学理学部)
 - 2011年12月6-7日 CMRI 第2回シンポジウム「計算材料科学の展望: 構造用材料の機械的性質・耐熱強度における課題克服と産官学連携推進に向けて」(東北大学金属材料研究所)
 - 2012年6月18-19日 CMRI 第1回シンポジウム (東北大学金属材料研究所)
 - 2014年3月1日 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>・大型研究施設 (CMSI・SPRING-8・J-PARC・KEK) 連携シンポジウム 2014~大型研究施設を利用した物質・材料研究の課題共有と共創~ (東京大学物性研究所)
 - 2015年6月23日 平成27年度第1回 CMRI 研究会—腐食問題および構造材料の解明と設計のための大規模計算科学の課題— (東北大学片平北門会館、東北大学青葉山東キャンパス)
- 各種学協会における鉄鋼材料の元素機能解明/元素戦略に関する情報発信/啓蒙活動を積極的に行っている。主な活動は以下の通り。
 - 日本鉄鋼協会「鉄鋼における i-s 溶質原子間相互作用とナノクラスタ形成」フォーラムにおける研究活動の主催 (座長: 沼倉宏、委員: 大谷博司、古原忠、津崎兼彰、2010~14年)
 - 日本鉄鋼協会「鉄鋼中の軽元素の挙動と力学特性の基礎」フォーラムにおける研究活動の主催 (座長: 沼倉宏、委員: 大谷博司、古原忠、2014~16年)
 - The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012)の主催、論文集の発刊 (日本鉄鋼協会主催、組織委員長および編集担当: 沼倉宏、古原忠、潮田浩作)
 - 「鉄鋼科学セミナー」の主催による国際会議 ISSS2012 の概要紹介と課題整理 (日本鉄鋼協会主催、企画世話人: 沼倉宏、古原忠、潮田浩作、2013年6月)
 - 日本学術振興会 耐熱金属材料第123委員会 第22回討論会「耐熱鋼の基礎・応用および現状・将来」における講演 (講師 沼倉宏「鉄中の溶質原子間相互作用 - 元素戦略の基礎研究」、2012年11月、東京)
 - 日本金属学会セミナー「構造材料の元素戦略」における講演 (講師 津崎兼彰「鉄鋼材料の元素戦略: 産業界ニーズにこたえるための元素機能の解明」、沼倉宏「フェライト鋼における固溶元素の機能と原子間相互作用: 基礎と新知見」、2013年1月、東京)
 - The symposium on "Atomistic Effects in Migrating Interphase Interfaces - Recent Progress and Future Study" の主催 (米国TMS、企画世話人: 古原忠)
 - 日本塑性加工学会における研究紹介

東関東支部総会・第38回技術懇談会「鉄鋼材料開発最前線」(講師:古原忠)
第48回塑性加工技術フォーラム「構造用金属材料の組織制御と組織評価の最前線」(講師:古原忠)

- 東北大学金属材料研究所夏期講習会における企業研究者/技術者対象の講義
第81回(2011年7月27-29日、名古屋、講師:古原忠)
第83回(2013年7月24-26日、神戸、実行委員長および講師:古原忠)
- 東北大学金属材料研究所共同研究ワークショップ「鉄鋼材料照射影響機構研究の最近の進展 ~ナノ組織から機械的特性へいかにつなげるか」(講師:古原忠、2011.9.30)
- 元素戦略/希少金属代替材料開発 第9回合同シンポジウム(発表者:古原忠、2015.2.24)

§5 研究期間中の活動

沼倉グループの博士研究員 SOUISSI Maaouia に関しては、学会(日本金属学会、日本鉄鋼協会)の春秋講演大会はもとより、下記のような関連する研究活動に積極的に参加させている(旅費を支弁するだけでなく、日本学術振興会の委員会で委員の共同研究者として講演させるなどしている)。

- ✓ The 3rd International Symposium on Steel Science - ISSS 2012 (2012年5月、京都)ポスター発表
- ✓ Asian Consortium on Computational Materials Science 研究集会(6th: 2012年2月、7th: 2012年11月、10th: 2015年11月、仙台)いずれもポスター発表
- ✓ WIEN2k(第一原理計算ソフトウェア)国際ワークショップ(2012年9月、早稲田大学)受講
- ✓ 日本学術振興会 材料の微細組織と機能性 第133委員会 研究会(2013年1月、東京)講演
- ✓ 日本学術振興会 合金状態図 第172委員会 研究会(2013年4月、2015年5月、東京)講演
- ✓ The 8th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM-8)(2013年8月、ハワイ州ワイコロア)ポスター発表

加えて、2013年度の国際強化支援で Marcel SLUITER 博士との研究討論のためデルフト工科大学へ派遣した。研究の進展とともに視野を広げるのにも有益な機会となった。

津崎グループの博士研究員の関小華は長年 NIMS に勤務していたが、本国での教員職を希望していたため、NIMS では質の高い研究論文の執筆を第一に本人のキャリア向上に努めた。その結果、大連理工大学の教授職への採用赴任が認められ、2013年10月より勤務している。博士研究員から直接教授職(任期なし)への採用は極めてまれであり、本人の努力と研究成果の高さがうかがわれる。CREST 研究への参画は限られた期間であったが、本人は本プロジェクトへ参画できたことを感謝している。これらの日本での成果を生かして昨年度中国の科研費である国家自然科学基金 National Natural Science Foundation of China (NSFC)に応募採択されている。また本人は日本で学位を取得し日本をよく知る研究者であることから、今後の国際連携にとって必ず役に立ってくれると期待される。

津崎グループの博士研究員の張鈴は、局所力学挙動解析に関する研究活動で大きな成果を上げ、その実績により2015年3月から重慶大学の教授職に就いている。CREST プロジェクト開始から参画し、PRL など多くの著名な雑誌に成果を発表した。重慶大学に着任後も日本との連携を希望しており、今後も強いパートナーシップを維持できると期待される。

5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2012年 3月11-13日	The symposium on "Atomistic Effects in Migrating Interphase Interfaces - Recent Progress and Future Study" TMS 2012 annual meeting (古原忠：企画世話人)	Walt Disney World Swan and Dolphin Resort、Orlando、FL、U. S. A.	延べ 150人 程度	発表 41 件
2012年 3月29日	日本鉄鋼協会シンポジウム 「鉄鋼材料におけるナノスケールの不均一性とその制御 — 元素機能を中心に」 (企画世話人代表 沼倉宏)	横浜国立大学	150人 程度	国際鉄鋼科学シンポジウム (ISSS2012) の主要トピックスの一つである溶質元素の相互作用に関する最新の研究紹介と討議、発表 9 件
2012年 5月27-30日	The 3rd International Symposium on Steel Science (ISSS 2012) (日本鉄鋼協会主催 実行委員長:沼倉宏、古原忠、潮田浩作)	関西セミナーハウス	82人	当研究課題と関連が深いテーマ「鉄鋼におけるナノスケールの微視的不均一」を中心とした研究発表と討論
2012年 8月9-10日	日本鉄鋼協会フォーラム 「鉄鋼における i-s 溶質原子間相互作用とナノクラスタ形成」 (座長 沼倉宏) 第 5 回研究会 (フォーラム登録会員の参加)	作並一の坊	19人	i-s 溶質原子間相互作用に関する研究討論
2013年 1月23日	日本金属学会分科会セミナー 「構造材料の元素戦略」 (古原忠：企画世話人；津崎兼彰、沼倉宏：講師)	エッサム 神田ホール	51人	構造材料に用いられる元素の近未来資源リスクと、我が国の材料技術の優位性確保に資する元素戦略的な視点に立った構造材料設計に関する最新の研究動向を紹介。講演 7 件
2013年 6月3日	日本鉄鋼協会 第3回鉄鋼科学セミナー「鉄鋼における微視的不均一 — 基礎および微細組織と特性への影響」(企画世話人代表 沼倉宏)	東京八重洲ホール	64人	2012年5月に開催されたISSS 2012の紹介と、主な内容(鉄鋼材料中の微量元素の分布状態およびその材料特性との関係に関する近年の発展)に関する講演 7 件
2013年 7月9日	京都大学 構造材料元素戦略研究拠点 平成 25 年度 第 2 回シンポジウム「構造材料研究プロジェクトの新展開」 (古原忠、津崎兼彰：講師)	京都大学 楽友会館	80人	現在遂行されている構造材料研究の大型プロジェクトの紹介および研究拠点主要メンバーからの発表による情報および意見交換、講演 7 件

2013年 7月 12-13日	日本鉄鋼協会フォーラム 「鉄鋼における i-s 溶質原子間 相互作用とナノクラスタ形成」 第 6 回研究会 (座長 沼倉宏) (フォーラム登録会員の参加)	関西セミ ナーハウ ス	19 人	元素機能解明における計算 科学的アプローチの紹介 と、鉄鋼の組織形成および 力学特性におよぼす軽元素 の役割に関する情報および 意見交換、講演 6 件
2014年 3月 23日	シンポジウム「鉄鋼中の軽元素 — 溶質-溶質および溶質-欠陥相 相互作用の基礎と新展開」	東京工業大 学	130 人	沼倉が企画し本チームのメン バーが中心となって開催した 公開シンポジウム
2014年 4月 28日	インフォーマルセミナー「マル テンサイトの組織と強度」	大阪府立大 学 (学内公 開)	25 人	研究討論会 (主催: 沼倉宏)
2014年 6月 5日	第 4 回国際鉄鋼科学シンポジウ ム ISSS 2014 準備会議研究会	JR 博多シ ティ	20 人	研究討論会 (主催: 津崎)
2014年 6月 23日	セミナー「Solute-solute interaction in iron」	デルフト工 科大学 (学 内公開)	12 人	学術交流と研究討論会 (主 催: M. Sluiter)
2014年 7月 16-17日	「鉄鋼中の軽元素の挙動と力学 特性の基礎」フォーラム集会	大阪府立大 学なんばセ ンター	16 人	研究討論会 (主催: 沼倉宏)
2014年 11月 3-6日	第 4 回国際鉄鋼科学シンポジウ ム ISSS 2014 (実行委員長: 津崎兼彰、 大村孝仁、辻伸泰)	関西セミナ ーハウス	90 人	研究発表と討論会
2015年 8月 31日	第 4 回鉄鋼科学セミナー「損 傷と破壊の鉄鋼研究: その最前 線と課題」(企画世話人代表: 津崎兼彰)	フクラシ ア品川	52 人	第 4 回国際鉄鋼科学シンポ ジウムにおける議論の総 括、先端研究の成果とその 後の進展の紹介、発表 8 件
2015年 9月 18日	日本鉄鋼協会シンポジウム 「鉄鋼中の軽元素—解明すべき 課題」 (企画世話人代表 沼倉宏)	九州大学	77 人	鉄鋼中の軽元素の存在状態 と特性との関係に関する最 新の研究紹介と討議、発表 8 件

§6 最後に

本研究課題は、領域の戦略目標「レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出」で想定される研究の進め方に沿って、以下の通り非常に順調に進捗してきたと言える。

- 1) フェライト鋼の高強度・高延靱性を目的とする材料機能として設定し、それを実現するための構造制御の原理を、ナノクラスタリング・析出と結晶粒界での元素トラッピング、の2つの観点で検討した。
- 2) その発現原理を具現化するためのナノスケールの物質構造のコンセプトとして、を、以下に挙げる材料組織のデザインを行った。
 - a)高強度化 - 準安定元素クラスターの生成を前駆とした安定相の微細分散化、
 - b)高靱性化 - 加工熱処理による超微細伸長粒による高靱性破壊形態、
微量 B 利用による溶接部高靱性化組織形態
- 3) 必要なナノスケール構造を有する材料を実際に創成し、その機能の発現を確認・検証した。
- 4) 精密物性の実験的測定および第一原理に基づく理論計算の両面からの元素間相互作用の定量的評価を追求し、i-s原子間相互作用の本質解明に大きく前進した。

今後、「物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効利用するという観点から従来の材料研究を再構成する」ため、基礎的研究課題の継続的検討を進めるとともに、実用鋼における各種元素機能の検討も視野に入れながら、低合金フェライト鋼の高強度、高延靱性化設計における「希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」べく、産学官の研究者コミュニティと連携・討論しながら研究を推進する予定である。

本研究の元素機能の理解に必要な基礎検討課題において用いられている研究手法、および、既に得られ、また今後得られることが期待される研究成果は、あらゆる鋼種における材料設計と深く関連するものである。炭素、窒素の利用は鉄鋼の高強度化に最も有効であるが、現在のNEDO研究プロジェクト「革新的新構造材料等技術開発」においても、次世代の高強度高延性鋼板としてレアメタル添加量を抑えた中高炭素鋼板の開発が目標とされている。本プロジェクトで検討したBの有効利用による鉄鋼の高靱性化も、今後のさらなる高強度鋼の応用が推進される中、安心安全な社会インフラの構築の上で重要になると考えられる。

以上の通り、本研究で検討している鉄鋼の軽元素戦略は、次世代の鉄鋼材料の研究開発において大きなインパクトを与えたいと言える。