

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	宮本吾郎
研究機関名	東北大学
所属部署名	金属材料研究所
役職名	准教授
研究課題名	界面組成の高度制御法確立による構造用金属材料の力学特性向上
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究では、構造用金属材料の粒界における元素間の相互作用を実験的に解明したうえで、計算状態図の考え方を粒界に適用し、粒界への元素濃化（粒界偏析）を設計する粒界偏析設計の概念の有効性を実証し、力学特性を向上させる指導原理を確立することを目的としている。そこで、2022年度は、①粒界液相モデルによる粒界炭素、窒素濃度偏析量計算と実測値との比較、②Fe-C-P系における粒界偏析解析、③パーシステントホモロジーによる粒界構造の理論解析、を行った。

①粒界液相モデルで計算した粒界炭素偏析量を実測値と比較したところ、計算値は実測値と定量的に良く一致することが示された。一方、窒素偏析の計算値は実測値と大きく乖離する。これは、液体窒素は高温で存在せず実測できないため、熱力学データベースにおける液体窒素の熱力学パラメータの低精度に起因するものと考えられる。

②多元系における粒界偏析評価にこれまで確立した手法を適用するため、粒界を脆化させるPに注目しF-0.01P合金に炭素を添加して、平衡偏析量を三次元アトムプローブで測定した。その結果、粒界におけるC偏析量が増加するほどP偏析量が減少し、粒界液相モデルはその傾向を定量的に再現できることが明らかとなった。

上記の①、②の結果は、高精度の液相の熱力学パラメータがあれば粒界液相モデルは異種元素間の相互作用も含めて粒界における偏析挙動を定量的に予測することができるという極めて重要な知見である。

③粒界における侵入型偏析の理論解析の困難さの一つは偏析サイトの検出にある。そこで、分子動力学法で作製した対象傾角粒界およびランダム粒界に対して、パーシステントホモロジーを適用したところ、粒界における侵入型サイト検出に有効であるという重要な結果を得た。