

TSUBAME 共同利用 令和 4 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 ベイナイト変態中の準安定オーステナイトにおける固溶元素と炭素原子の相関の解明
英文: Correlation between solid solution elements and carbon atoms in metastable austenite during bainitic transformation

利用課題責任者 永野 隆敏
First name Surname Takatoshi Nagano

所属 茨城大学大学院理工学研究科 工学野物質科学工学領域
Affiliation
URL

邦文抄録(300 字程度)

Fe-Si-C 合金中の炭素の挙動と、炭素の濃度変化による結晶構造への影響を第一原理計算の VASP によって算出する。その結果によって Fe-Si-C 合金中の準安定オーステナイト相の炭素濃度が高濃度化するメカニズムを明らかにした。また炭素濃度の違いによって変態の優位性が変わることも明らかにした。オーステナイト中の炭素濃度が異なる理由として、オーステナイト中にケイ素が固溶しているとき炭素濃度が 0.4 wt% 付近まではケイ素が固溶していないときよりも安定することが挙げられる。このことからオーステナイトに固溶しているケイ素近傍に炭素がトラップされ、炭素濃度の差が生じたと考えられる。変態の優位性の差については高炭素濃度であるオーステナイトはケイ素が固溶している可能性が高く、このケイ素が変態を阻害したと考えることで説明できる。

英文抄録(100 words 程度)

The behavior of carbon in Fe-Si-C alloys and the effect of carbon concentration changes on the crystal structure are calculated by first-principles VASP calculations. The results reveal the mechanism of the high carbon concentration in the metastable austenite phase in Fe-Si-C alloys. It is also clarified that the predominance of transformation changes with carbon concentration. The reason for the difference in carbon concentration in austenite is that when silicon is solidly soluble in austenite, the carbon concentration is more stable up to around 0.4 wt% than when silicon is not solidly soluble in austenite. This suggests that carbon is trapped in the vicinity of silicon solid solution in austenite, resulting in the difference in carbon concentration. The difference in the predominance of transformation can be explained by considering that austenite with a high carbon concentration is likely to have silicon in solid solution, and that this silicon inhibits transformation.

Keywords: 5つ程度

熱処理 高炭素濃度オーステナイト ベイナイト変態 セメントナイト 鉄中のケイ素固溶 up-hill diffusion

背景と目的

次世代の強度-延性を兼ね備えた鉄鋼材料として、準安定オーステナイト(FCC)相を含む複相組織が有力視されている。その一つにベイナイト組織を利用した鋼の開発がある。この組織形成には炭素濃度コントロールが重要であることがわかっているが、鉄鋼中炭素位置と固溶元素の相関を解明するには実験的手法だけでは不明な点が残ってしまう。そこで第一原理計算である VASP によって、炭素との相関を示す元素とその程度を比較しメカニズムを明らかにし、その金属組織のコントロールをより容易にすることを目的とする。

概要

超高強度、高延性鋼板を開発することは建物や自動車をはじめ鉄鋼を用いた工業製品の性能を向上させるために重要である。そのために鉄鋼中炭素位置と固溶元素の相関を解明する必要がある。

Fe-Si-Mn-C 鋼を用いたこれまでの研究で、全量 γ 相となる温度からの急冷によるオーステンパー処理中のベイナイト変態進行を観察し、処理温度を 573-773K としたすべての条件で γ 中炭素濃度の二極化が観測された。この炭素濃度二極化のメカニズム解明と

して、固溶元素と炭素原子との相関を第一原理計算によって明らかにする。

多い別の物質についても同様の評価を行う必要がある。

結果および考察

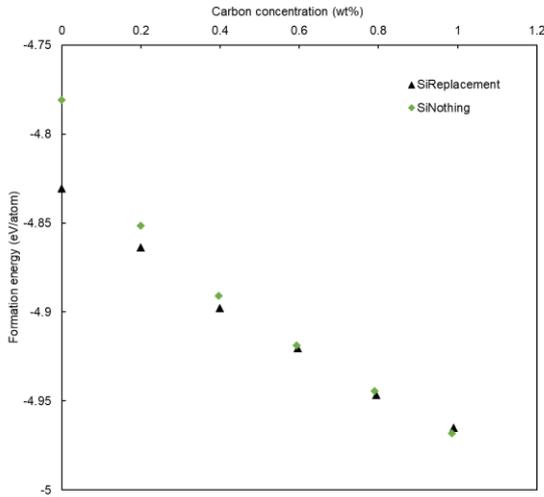


図 1 オーステナイト中の C 濃度変化による安定性の変化

シミュレーションによって以下のことがわかった。

- ・オーステナイト中を炭素が拡散するとき、ケイ素が固溶していると炭素の経路に指向性が生じる。
- ・オーステナイト中の炭素濃度が変化するとき、炭素濃度が一定値までケイ素が固溶しているときの方が安定している(図 1)。
- ・セメンタイトはケイ素の固溶が少ないほど安定する。
- ・セメンタイト中、炭素濃度が小さいときはケイ素が固溶しているときの方が安定する。

オーステナイト中の炭素濃度が異なる理由として、オーステナイト中にケイ素と炭素の相関が考えられる。

低炭素濃度オーステナイトから先に変態が行われ、その後高炭素濃度オーステナイトが変態を行うという現象について、このケイ素が変態を阻害したと考えられる。

まとめ、今後の課題

第一原理計算の VASP によって Fe-Si-C 合金中の準安定オーステナイト相の炭素濃度が高濃度化するメカニズムを明らかにした。また炭素濃度の違いによって変態の優位性が変わることも明らかにした。今後はケイ素だけでなく鉄鋼材料に含有する機会が