The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	鉄鋼材料における粒界脆化に関する計算科学的研究
Author(s)	伊藤, 一真
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/77630
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　伊　藤　一　真　）	
論文題名	鉄鋼材料における粒界脆化に関する計算科学的研究

論文内容の要旨

鉄鋼材料において、粒界偏析は種々の機械的特性に大きな影響を及ぼす。特に不純物元素や合金元素の粒界偏析によって生じる粒界脆化は、低温靭性や熱間延性の著しい劣化を引き起こすため、新規鋼材の機械材料としての適用の大きな足かせとなっている。粒界脆化の問題を解決するために実験、理論の両側面から多くの研究がなされているが、未だ不明な点が多い。本博士論文では、電子・原子レベル解析に基づく計算科学手法を粒界偏析及び粒界脆化に関わる種々の現象に適用することで、鋼材の機械的特性の向上に資する根本的知見の獲得及び予測手法の構築に取り組んだ。

第1章では、研究背景・目的として鉄鋼材料の高強度化のニーズの高まりと、それに伴う粒界脆化に関する研究の重要性について述べた。続いて粒界脆化の従来研究に及び粒界脆化の解明・抑制に向けた課題について擬説した。

第2章では、鉄鋼材料において顕著な粒界脆化を引き起こすP及びSが、粒界偏析し、粒界脆化を引き起こすメカニズムについて、第一原理計算に基づく新たな電子状態解析手法を導入し、適用することで明確化した。

第3章では、鉄鋼材料における最重要合金元素であるMnが粒界脆化を引き起こすメカニズムについて、第一原理引張試験により解析し、Fe粒界の破壊応力は偏析したMnの磁気状態と深く関係していることを明確化した。そしてこの知見に基づき、Mnの磁気状態を制御することによるMn含有鋼の靭性改善の可能性を示した。

第4章では、粒界偏析を制御し、鋼材の機械的特性を向上させるための予測手法として、多結晶材料における合金元素の粒界偏析量の非経験的予測手法を構築した。構築した予測手法を直接比較が可能な実験結果が存在するbcc Fe中におけるPの粒界偏析に適用し、優れた予測精度が得られることを確認した。

第5章では、第2章から第4章を総括し、本博士論文の結論を述べた。

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　伊　藤　一　真　）			
論文審査担当者	（職）		氏　名
	主 査	教　授	尾方　成信
	副 査	教　授	後藤　晋
	副 査	教　授	垂水　竜一

論文審査の結果の要旨

伊藤一真氏の博士論文は、鉄鋼材料における粒界偏析および粒界脆化に関して、計算科学手法を用いた解析を実施し、その詳細なメカニズムの解明と予測について研究した成果をまとめたものである。

鉄鋼材料における溶質元素の粒界偏析に起因した粒界脆化は、種々の機械的特性を顕著に劣化させるため、鋼材の機械的特性向上のためには、その詳細なメカニズムを理解し、制御する必要がある。この際、粒界偏析及び粒界脆化は結晶粒間の数原子層領域で生じることから、電子・原子スケールの計算科学手法の適用が有効である。このような研究背景のもと、伊藤氏による本研究は、溶質元素の粒界偏析から粒界脆化に至るメカニズムの電子・原子スケールでの解明と、非経験的な粒界偏析の予測手法の構築に成功している。具体的には、鉄鋼材料において特に深刻な粒界脆化を引き起こすP及びSが粒界偏析し、粒界脆化を引き起こす機構を、従来の解析における課題を解決する新たな電子状態解析手法を提案し、適用することで、明確化することに成功した。次に、Mnの粒界偏析に起因した粒界脆化のメカニズムの解明を目的として、Mnが偏析したFe粒界の応力付加に伴う原子配置、電子状態の変化を詳細に解析し、Mnの磁気状態が粒界破壊に多大な影響を与えていることを明らかにするとともに、その理由を電子論に基づき説明することに成功した。さらに粒界偏析を制御し、粒界脆化を抑制するための予測手法として、多結晶粒界における粒界偏析の新たな非経験的予測手法を構築した。構築した予測手法は従来手法に比べてはるかに優れる予測精度を示した。

令和２年８月７日に審査担当者と伊藤氏とで審査委員会を開き、伊藤氏に博士論文の内容について説明を行わせ質疑・討論および口頭試問を行った。論文の内容はこの分野の進展に寄与する十分な新規性を有していることから、本論文は博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。