



大阪科学・大学記者クラブ 御中

(同時提供先：文部科学記者会、科学記者会)

2024年5月15日

大阪公立大学

鉄鋼部品の表面硬化処理における 炭素・窒素と合金元素の結合メカニズムを解明

<ポイント>

- ◇鋼製歯車などの表面を硬くするための、炭素や窒素を添加する処理に着目。
- ◇添加処理におけるアルミニウムやチタンなど12種類の合金元素について、120パターンの組み合わせを理論計算し、結合メカニズムを体系的に解明。

<概要>

日常生活に不可欠な自動車や電車の主な材料の一つは鉄鋼です。鉄鋼には鉄のほかに、シリコンやマンガンなどさまざまな合金元素が含まれており、その組み合わせにより強さや柔軟さをもつ高機能な鉄鋼材料が作られます。また、エンジンの歯車などの部品には非常に大きな負荷がかかります。そのため、炭素を浸み込ませ加熱して硬化する浸炭や、窒素を内部に拡散浸透させて硬い層を作る窒化を活用し、鉄鋼部品の表面に耐食性や耐摩耗性をもたらせます。これらの処理において、炭素や窒素が合金元素と結びつくことによって硬化することは知られていますが、合金元素がそれぞれどのように結合するかについて体系的な調査は行われていませんでした。

大阪公立大学大学院情報学研究科の上杉 徳照准教授、工学研究科の瀧川 順庸教授、大阪公立大学工業高等専門学校の上野 健司校長（当時、大阪府立大学教授）らの研究グループは、浸炭と窒化において、アルミニウムやチタンなど計12種類の合金元素がそれぞれ炭素や窒素とどのように相互作用するかについて、120パターンの組み合わせを理論計算しました。その結果、チタンが特定の場所に配置するときに窒素や炭素と結びつき、鉄が硬化することが分かりました。また、鉄原子より大きい元素でないと結合しないことを解析データで示しました。本成果により、鉄鋼の強化と耐久性向上のメカニズムについて理解を深め、より優れた材料開発への貢献が期待できます。

本成果は2024年4月6日に「ISIJ International」のオンライン速報版に掲載されました。

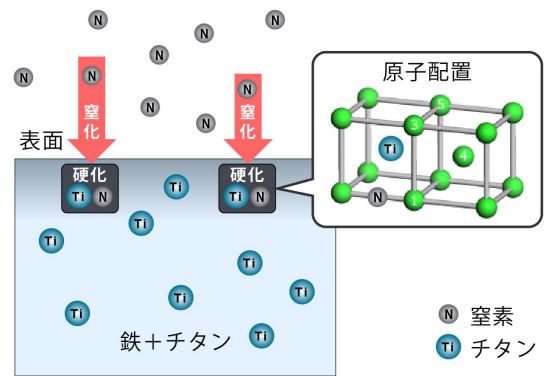


図 窒化処理イメージ

多数の計算結果からのメカニズム解明は容易ではありませんでしたが、重回帰分析と層別分析を用いて試行錯誤を重ねました。今後、さらに多くの組み合わせについて機械学習で分析を進め、実際の製造プロセスでの材料性能向上に寄与する知見が得られることを期待しています。



上杉 徳照准教授

<研究の背景>

脱炭素社会の実現に向けて、ガソリン車から電気自動車への転換が進んでおり、電気モーターや減速機の鋼製歯車には、静音性だけでなく高速回転に耐えうる耐摩耗性や耐疲労性が求められます。高機能な鉄鋼材料を設計するためには、鉄鋼の表面改質方法である浸炭や窒化のプロセスを最適化し、元素間の相互作用を理解することが不可欠ですが、これまで体系的な調査は行われていませんでした。

<研究の内容>

浸炭や窒化では、鉄鋼の表面に炭素や窒素を導入し、微細な炭化物や窒化物、ナノクラスターを形成することで鉄鋼の硬度が向上します。本研究では、浸炭と窒化に焦点を当て、元素間の相互作用エネルギー^{*1}について第一原理計算^{*2}を用いて定量的に評価。炭素や窒素の原子と、アルミニウムやチタンなどの原子との間で形成される、さまざまな位置関係や組み合わせにおける二原子クラスター^{*3}の相互作用を調べました。元素の組み合わせは、炭素と窒素それぞれに12種類の合金元素、さらに、体心立方構造の位置関係において最も近いものから5番目のものまで、合計120パターンについて計算しました。

分析の結果、120パターンの中で特定の位置関係にある限られた元素のみ、炭素や窒素と強く結合することが判明しました。さらに、重回帰分析^{*4}と層別分析^{*5}を利用して解析したところ、鉄原子より大きい元素でないと炭素や窒素と結合しないことが分かりました。また、三原子クラスター間の相互作用エネルギーについても調査し、原子の配列の違いによりエネルギー状態が大きく変わることで、鉄を硬化させるナノクラスターを形成する元素の組み合わせでなければ、三原子クラスターは結合しないことを突き止めました。

<期待される効果・今後の展開>

本研究で得られた知見は、特定の用途に適した鉄鋼材料開発につながると期待でき、表面改質プロセスの最適化の基礎となりえます。今後は、さらに多くの元素の組み合わせや異なる環境条件下での相互作用を調査することに加え、産業界との連携を進めることで、実際の製造プロセスにおける鉄鋼材料の性能向上に貢献すると考えられます。

<用語解説>

- ※1 相互作用エネルギー：鉄に含まれる原子が引き合うか、反発するかを示す指標。マイナスの値であれば引き合い、プラスなら反発する。
- ※2 第一原理計算：原子レベルでのエネルギーの変化を精密に予測し、相互作用エネルギーを算出。
- ※3 二原子クラスター：鉄に含まれる異なる元素の2つの原子が凝集した状態のこと。三原子クラスターでは異なる元素の3つの原子が凝集した状態となる。
- ※4 重回帰分析：原子サイズや電子数など人間が解釈可能な複数の因子から相互作用エネルギーを予測し、どの因子が相互作用エネルギーに強く働いているかを分析する。
- ※5 層別分析：電子数などが同じ元素のグループを作り、グループ内での比較を行うことで、原子サイズが相互作用エネルギーに及ぼす影響を分析する。

<掲載誌情報>

【発表雑誌】 ISIJ International

【論文名】 Interactions between interstitial and substitutional elements of solute diatomic and triatomic clusters in α -Fe from first-principles calculations

【著者】 Tokuteru Uesugi, Shuji Ashino, Yorinobu Takigawa, Kenji Higashi

【掲載URL】 <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2024-062>

【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院情報学研究科
准教授 上杉 徳照 (うえすぎ とくてる)
TEL : 072-254-9483
E-mail : uesugi@omu.ac.jp

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課
担当：谷
TEL : 06-6605-3411
E-mail : koho-list@ml.omu.ac.jp