

平成 30 年 6 月 22 日現在

機関番号：24403

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K21294

研究課題名(和文) 第一原理計算に基づいた強度と延性に優れたアルミニウム合金の開発

研究課題名(英文) Development of aluminum alloys excellent in strength and ductility based on first-principles calculations

研究代表者

上杉 徳照 (Uesugi, Tokuteru)

大阪府立大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：10405342

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：第一原理計算による合金設計に基づいてAl-8Mg-0.2Zr合金を開発した。本研究ではAl-8Mg-0.2Zrに加工硬化、析出強化、結晶粒微細化強化を行い、高強度・高延性化を目指した。Al-8Mg-0.2Zr合金を高強度・高延性化する手段として摩擦攪拌プロセスによる結晶粒微細化が有効であった。摩擦攪拌プロセスを行った試料では、伸び40%という高延性を保ったまま、引張強度435MPaという高強度化を達成できた。高延性を発現するには再結晶が完了しており、相が析出していない微細組織が必要であることが明らかになった。

研究成果の概要(英文)：Al-8Mg-0.2Zr alloy has been developed from the first-principles calculations. The aim of this study is achieving high strength and good ductility of Al-8Mg-0.2Zr alloy by work hardening, precipitation strengthening and grain refinement strengthening. As a result, the grain refinement by friction stir processing was effective as a means to achieve high strength and good ductility of Al-8Mg-0.2Zr. The newly developed Al-8Mg-0.2Zr alloy after friction stir processing exhibited high tensile strength of 435 MPa along with the large elongation to failure up to 40 %.

研究分野：計算材料科学・構造材料

キーワード：第一原理計算 Al合金 高強度 高延性 粒界強化

### 1. 研究開始当初の背景

現在の構造用金属材料では、自動車等輸送機器の軽量化・安全性、工場プラント等製造装置の安全性等からあらゆる面での高強度化、長寿命化が図られている。ただし、強度が上昇すると一般には延性やじん性が低下することから、強度と延性を同時に向上させる革新的な構造用金属材料の開発が必要である。このような革新的な構造用金属材料の開発は試行錯誤に頼った合金探索による方法ではもはや難しいと考えられるので、構造材料の原理・原則に基づいて、計算材料科学を活用した材料開発が求められている。このような状況において、これまでに第一原理計算による合金設計に基づいて強度と延性を同時に向上させた Al-8Mg-0.2Zr 合金を開発した。

Al-8Mg-0.2Zr の開発にあたっては、まず固溶強化に着目した。固溶強化は添加する固溶元素によって大きく強度増分が変化するので、添加元素の最適化が必要である。そこで、第一原理計算により 55 種類の添加元素について固溶原子のミスフィットひずみを算出し、固溶強化による強度増分を算出した結果、アルミニウムの固溶強化に最適な合金元素は Mg であることを明らかにした。延性破壊には空洞の形成が寄与しているので、延性を向上させるには空洞の発生を抑制する必要がある。空洞は第二相粒子やその界面、あるいは粒界で発生することが分かっている。第二相粒子での空洞形成を防ぐには第二相粒子を除外することが確実であるので、高純度アルミニウム地金を用いて Fe、Si などの不純物元素を含む第二相粒子を低減させた。第二相粒子以外の空洞形成の起点は粒界であるので、添加元素によって粒界強化を図った。具体的には、粒界凝集エネルギーの第一原理計算によって粒界の強度を向上させる合金設計が試みた。その結果、アルミニウムの粒界強化に最適な合金成分は Zr であることを明らかにした。

以上の経緯から、純度 99.9~99.7% の高純度 Al 地金に Mg と Zr を添加した合金を選定したが、添加量は第二相粒子を形成しないように固溶範囲内を狙って Al-8Mg-0.2Zr とした。その結果、強度と延性に優れた Al-8Mg-0.2Zr 合金が開発できた。

### 2. 研究の目的

本研究では第一原理計算の合金設計に基づいてアルミニウム合金の高強度・高延性化を目指す。これまでに第一原理計算により、Al に対して粒界に偏析し、かつ粒界強化を大きく見込める元素として Zr が予測された。この予測を基に高濃度 Mg により固溶強化し、Zr により粒界強化により高延性化を狙って Al-8Mg-0.2Zr 合金が開発されている。本研究ではこれまでの成果を発展させて、Al-8Mg-0.2Zr 合金の更なる高強度・高延性化を目指す。そのために FSP (Friction Stir

Processing) による結晶粒微細化や加工硬化、析出強化を加える。

### 3. 研究の方法

Al-8Mg-0.2Zr 合金は 520 で均質化を行い、水冷した。加工硬化は、温間圧延(200、圧下率 80%)を行うことでひずみを導入した。圧延後の試料を 100-500 で 1 時間の熱処理を行い、転位密度や結晶粒径を変化させた。析出強化は、圧延・焼鈍後に人工時効を行った。焼鈍条件は 450 で 1 時間、時効条件は 200 で行った。結晶粒微細化強化は、微細化プロセスとして FSP と ECAE (Equal Channel Angle Extrusion) を用いた。ECAE では十分に焼鈍した φ20 mm の試料と内角 90° の金型を用い、共に 160 に加熱した状態で行った。ひずみ量を均一に加え、等軸粒を得るためにルート Bc で 8 パス行った。FSP では十分に焼鈍した厚さ 3 mm の板材を用い、ツール回転速度 600 rpm、送り速度 300 mm/min の条件で行った。

### 4. 研究成果

図 1 に加工まま材および熱処理後の Al-8Mg-0.2Zr 合金の降伏強度と伸びの関係を示す。加工硬化により強度は増加したが延性は減少することが明らかになった。加工後の熱処理については、350 以上で熱処理した試料は商用 Al 合金の強度と延性のトレードオフの関係を上回ったが、加工まま材や 300 以下で熱処理した試料は強度には優れていたが延性が大きく低下した。高延性を示すためには、再結晶が完了する 350 以上で熱処理を行う必要があることが明らかになった。

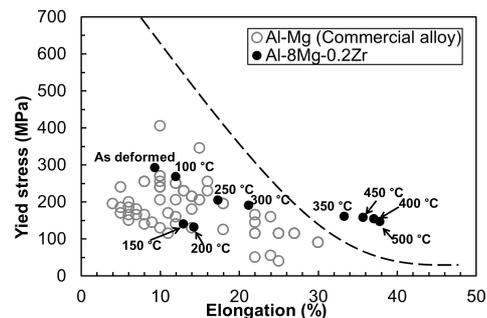


図 1 加工まま材および熱処理後の降伏強度と伸び

図 2 に Al-8Mg-0.2Zr 合金の時効処理後の降伏強度と伸びの関係を示す。2.4 時間の時効を行った試料の引張特性は焼鈍材とほぼ変わらず、商用 Al 合金の降伏強度と伸びのトレードオフを上回っている。しかし 24 時間、240 時間の時効を行った試料は焼鈍材に対して強度の増加は小さく、延性は大きく低下した。Al-8Mg-0.2Zr 合金では β 相が時効析出することで強度は増加したが、析出強化量に比べると延性の低下が大きく、高延性を保った高強度化を達成できなかった。

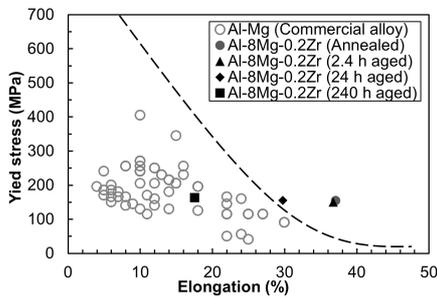


図2 時効処理後の降伏強度と伸び

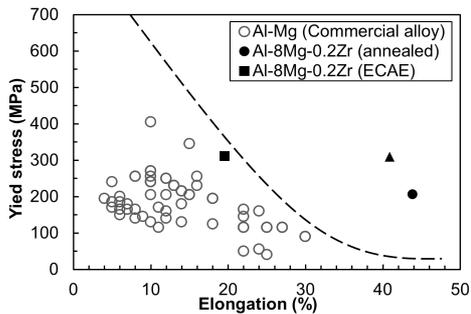


図3 ECAE 材、FSP 材の降伏強度と伸び

図3に Al-8Mg-0.2Zr 合金の ECAE 材、FSP 材の降伏強度と伸びの関係を示す。ECAE を行った試料は高強度を示したが、加工組織が残り動的再結晶はほとんど起こっておらず延性は減少した。FSP を行った試料は動的再結晶が起こり、粒径 1.2  $\mu\text{m}$  まで微細化しており、伸び 40% という高延性を保ったまま、引張強度 435MPa という高強度化を達成できた。Zr 添加による粒界強化つまり高延性を発現するには、再結晶が完了した微細組織が必要であることが明らかになった。

Al-8Mg-0.2Zr に加工硬化、析出強化、結晶粒微細化強化を行い、高強度・高延性化を目指した。以上の結果から、Al-8Mg-0.2Zr 合金を高強度・高延性化する手段として FSP による結晶粒微細化が有効であった。FSP を行った試料では、伸び 40% という高延性を保ったまま、引張強度 435MPa という高強度化を達成できた。高延性を発現するには再結晶が完了しており、 $\beta$  相が析出していない微細組織が必要であることが明らかになった。

また、最終年度である平成 29 年度には、Al-Mg 合金だけでなく時効析出型の Al-Cu-Mg 合金と Al-Zn-Mg-Cu 合金において Zr 添加による粒界破壊の抑制効果を調査し、高強度・高延性化を目指した。

図4に Al-Cu-Mg 合金、図5に Al-Zn-Mg-Cu 合金について、Zr 無添加材と Zr 添加材での時効後の引張強度と伸びの関係を示す。

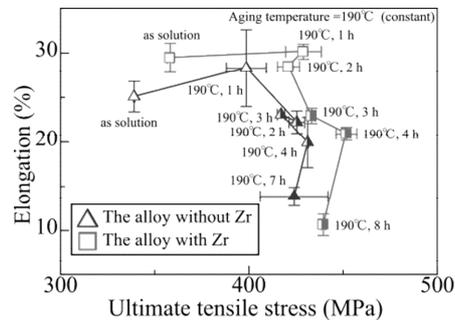


図4 Al-Cu-Mg 時効合金の引張強度と伸びに及ぼす Zr 添加の影響

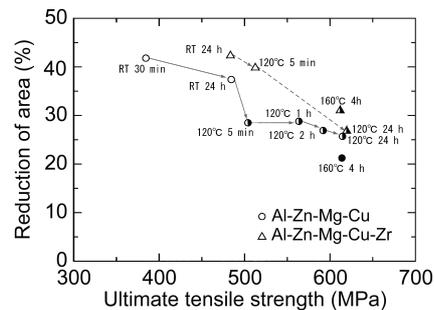


図5 Al-Zn-Mg-Cu 時効合金の引張強度と伸びに及ぼす Zr 添加の影響

Al-Cu-Mg 合金と Al-Zn-Mg-Cu 合金のいずれについても、時効硬化に伴い、粒内破壊から粒界破壊に遷移すると延性は大きく低下していたが、Zr 添加により、粒内破壊から粒界破壊に遷移する引張強度が上昇することを見出した。Al-Cu-Mg 合金と Al-Zn-Mg-Cu 合金のいずれについても、強度と伸びが両立する時効条件に最適化することで、Zr 添加により伸びを 5~6% 向上させることができた。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 3 件)

K. Wada, K. Takeshima, T. Uesugi, Y. Takigawa, K. Higashi, "Effects of Solute Fe, Zn and Mg on Recrystallization in Aluminum", Materials Transactions, 査読有, Vol. 57, pp.329-334 (2016).  
DOI: 10.2320/matertrans.MBW201515

T. Uesugi, H. Iwami, Y. Takigawa, K. Higashi, "Effect of solute elements on grain refinement during friction stir processing in high-purity aluminum", Materials Science Forum, 査読有, Vol. 838-839, pp.116-121 (2016).  
DOI:10.4028/www.scientific.net/MSF.838-839.116

T. Uesugi and K. Higashi, "Design of high-strength aluminum alloys based on first-principles calculations of misfit strain and grain boundary cohesion", Proceedings of Processing and Fabrication of Advanced Materials XXIV, pp. 552-563 (2015).

〔学会発表〕(計 11 件)

T. Uesugi, H. Iwami, Y. Takigawa and K. Higashi, "Effect of Solute Elements on Grain Refinement during Friction Stir Processing in High-Purity Aluminum", 12th International Conference on Superplasticity in Advanced Materials (Tokyo, Japan, September, 2015).

和田光司, 武島健太, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, 高純度アルミニウム合金の再結晶温度へ及ぼす溶質原子, 析出物の影響, 日本金属学会 2015 年秋期講演大会 (2015 年 9 月, 福岡).

T. Uesugi, Y. Takigawa and K. Higashi, "First-Principles Computational Materials Design of Aluminum Alloys as Structural Materials.", The 2nd FZU-OPU Joint International Symposium on Photocatalysis, Photo-Functional Materials, and Nano-Science & Technology (Fuzhou, China, November, 2015).

K. Wada, K. Takeshima, T. Uesugi, Y. Takigawa and K. Higashi, "Study of solute atoms and precipitates affecting recrystallization temperature in high purity Al-Fe alloy.", Twenty-Fourth International Symposium on Processing and Fabrication of Advanced Materials (Osaka, Japan, December, 2015).

T. Uesugi and K. Higashi, "Design of high-strength aluminum alloys based on first-principles calculations of misfit strain and grain boundary cohesion.", Twenty-Fourth International Symposium on Processing and Fabrication of Advanced Materials (Osaka, Japan, December, 2015).

吉岡浩司, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, 高強度 Al-Zn-Mg-Cu 合金の延性に及ぼす Zr の影響, 日本材料学会 若手学生研究発表会 (2016 年 10 月, 京都).

大手里奈, 青木良晃, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, Al-Cu-Mg 合金の再結晶粒径と時効硬化に及ぼす Zr 添加の影響, 日本材料学会 若手学生研究発表会 (2016 年 10 月, 京都).

吉岡浩司, 大手里奈, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, アルミニウム合金の高純度化による延性の向上, 軽金属学会関西支部 平成 28 年度若手研究者・院生による研究発表会 (2016 年 12 月, 大阪).

大手里奈, 吉岡浩司, 青木良晃, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, 高純度アルミニウム地金を用いた時効硬化型 Al-Cu-Mg 合金の引張特性, 軽金属学会関西支部 平成 28 年度若手研究者・院生による研究発表会 (2016 年 12 月, 大阪).

大手里奈, 青木良晃, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, 高純度 Al-Cu-Mg 合金の粒界破壊を引き起こす条件に及ぼす Zr 添加の影響, 軽金属学会 第 132 回春期大会 (2017 年 5 月, 名古屋).

大手里奈, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司, 高純度 Al-Cu-Mg 合金の Zr 添加と時効条件の最適化による粒界破壊の抑制, 日本金属学会 2017 年秋期講演大会 (2017 年 9 月, 札幌).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<https://tokuteruuesugi.jimdo.com/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

上杉 徳照 (UESUGI, Tokuteru)

大阪府立大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 10405342

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

瀧川 順庸 (TAKIGAWA, Yorinobu)

大阪府立大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 70382231

東健司 (HIGASHI, Kenji)

大阪府立大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 50173133