

令和 4 年 4 月 26 日現在

機関番号：73905

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04991

研究課題名(和文) チタンと鉄の中の合金元素近傍の局所格子歪解析とマルテンサイト変態への格子歪の影響

研究課題名(英文) Local Lattice Strain around Alloying Element and Martensitic Transformation in Titanium and Iron Alloys

研究代表者

森永 正彦 (Morinaga, Masahiko)

公益財団法人名古屋産業科学研究所・研究部・研究員

研究者番号：50126950

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：金属中に原子サイズの違う合金元素(M)が入ると、合金元素近傍の母金属格子に局所歪が導入されることは昔からよく知られている。本研究は、2元系のチタン合金と鉄合金の中のM近傍の局所格子歪の大きさを、擬ポテンシャル法を用いて初めて計算している。計算された局所格子歪の大きさは、Mや結晶構造とともに大きく変化する。チタン合金と鉄合金のマルテンサイト開始温度( $M_s$ )は、Mの周りに生じる局所格子歪と相関があり、局所格子歪は、これら両合金のマルテンサイト変態の進行を抑えるように働いている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

合金中の種々の合金元素近傍の局所格子歪の大きさを系統的に決定した最初の学術研究である。また、マルテンサイト変態は金属材料学の中核をなす変態であり、本研究結果は、実用上も重要な鉄合金やチタン合金の設計と開発を行う上で重要な知見を与える。

研究成果の概要(英文)：It is well known that local strains are introduced into the crystal lattice around a solute atom, M, due to the size mismatch between solute and solvent atoms in any alloy. In this study, local lattice strains are calculated for the first time in both binary Ti and Fe alloys, using the pseudopotential method.

The calculated local lattice strains are found to vary largely with M and the crystal structures. Also, there is a certain correlation between the martensite start temperature ( $M_s$ ) and the local lattice strains introduced around M. Such local lattice strains work to suppress the onset of the martensitic transformation in both Ti and Fe alloys.

研究分野：金属材料・物性

キーワード：チタン 鉄 マルテンサイト変態 局所格子歪 擬ポテンシャル 合金設計

### 1. 研究開始当初の背景

永い金属学の歴史にもかかわらず、母金属と合金元素 M のサイズミスマッチによって発生する「合金元素近傍の局所格子歪」(図 1) の問題は殆ど手かずの状態にある。最近、ハイエントロピー合金の機械的性質に、局所格子歪が大きな影響を及ぼすことが知られている。このような状況を踏まえ、局所格子歪についての基礎的な知見を得るために、この問題に初めて取り組むことにした。ただし、図 1 においては、後述する原子空孔の周りの局所格子歪についても図示している。

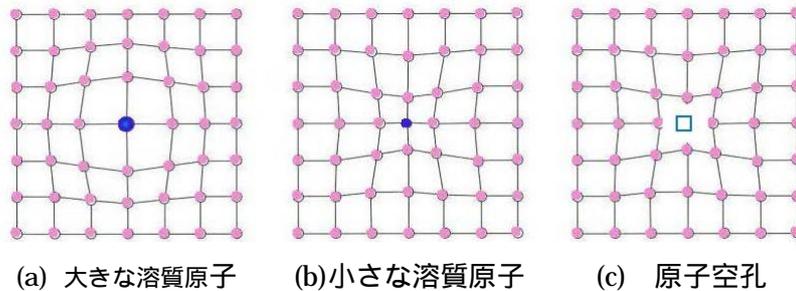


図 1 金属中の (a,b) 溶質原子と (c) 原子空孔の近傍の局所格子歪

### 2. 研究の目的

本研究では、チタンと鉄の中の合金元素近傍に生じる局所格子歪を初めて計算し、原子変位型の変態であるマルテンサイト変態との関係について調べる。

マルテンサイト相は、鉄鋼材料では主要な強化相である。チタン合金では形状記憶効果や超弾性の発現と関係しており、生体用合金開発には必須な相である。この原子変位型の変態に、合金元素 M 近傍での母金属原子の変位が影響を及ぼすことは十分考えられる。本研究では、そのような局所格子歪の新しい視点から、物性制御に有用な合金設計指針を導出することを目指している。

### 3. 研究の方法

合金元素 M 近傍での母金属原子の変位の計算には、図 2 (a,b,c) に示す hcp、bcc、fcc 金属に対応するスーパーセルを用いる。

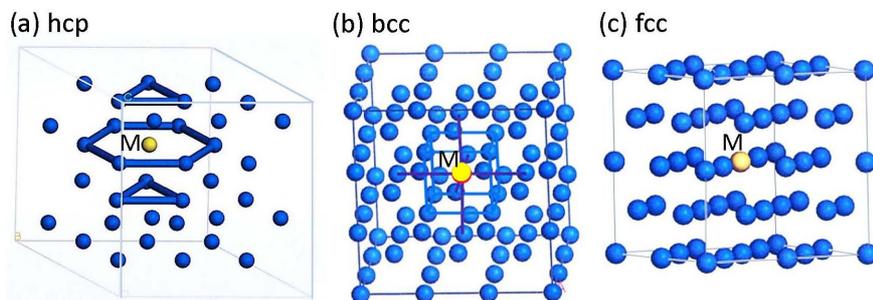


図 2 計算に用いたスーパーセル; (a) hcp 金属、(b) bcc 金属、(c) fcc 金属

例えば、hcp Ti の計算には、(a)に示すように、その単位格子を  $3 \times 3 \times 2$  個重ね、合計 36 個の原子からなるスーパーセルを作成する。その中の一つの Ti 原子を合金元素 M で置換し、平面波基底擬ポテンシャル法( CASTEP コード)[ 1 ]を用いて、周期的境界条件のもとで構造最適化を行う。合金元素 M の最近接位置にある 12 個の Ti 原子のみを格子緩和させ、それら Ti 原子の各格子点からの原子変位の大きさを決定する。

bcc Ti や bcc Fe の計算では、(b)に示すように、bcc の単位格子を  $3 \times 3 \times 3$  個重ね、合計 54 個の原子からなるスーパーセルを作成し、その中の一つの原子を置換型合金元素 M で置き換えて計算を行う。そして、合金元素 M の第一近接位置にある 8 個の原子と、第二近接位置にある 6 個の原子のみを格子緩和させ、それら原子の各格子点からの原子変位の大きさを決定する。

また、fcc Fe の計算には、(c)に示すように、fcc Fe の単位格子を  $2 \times 2 \times 2$  個重ね、合計 32 個の原子からなるスーパーセルを作成し、その中の一つの原子を合金元素 M で置き換えて計算を行う。そして、合金元素 M の第一近接位置にある 12 個の Fe 原子のみを格子緩和させ、それら原子の各格子点からの原子変位の大きさを決定する。

#### 4 . 研究成果

図 3 (a)は、hcp Ti 中の合金元素 M 近傍の格子歪の計算結果である。縦軸は hcp 結晶の a 軸方向の歪 $\Delta a/a$  と c 軸方向の歪 $\Delta c/c$  の和  $\Delta a/a + \Delta c/c$  (%) である ( a, c は格子定数 )。格子歪の大きさは、合金元素 M とともに大きく変化する。

図 3 (b)は、マルテンサイト変態 (  $\beta$ -Ti ( bcc )  $\alpha'$ (hcp)または $\alpha''$  ( orthorhombic ) ) の開始温度  $M_s$  が 573K である合金組成の実験値と、図 3 (a)に示した格子歪の関係を表している。興味深いことには、2 元系 Ti-M 合金において、 $M_s=573K$  の合金組成は、W, Mo を除けば、格子歪とともに直線的に変化している。

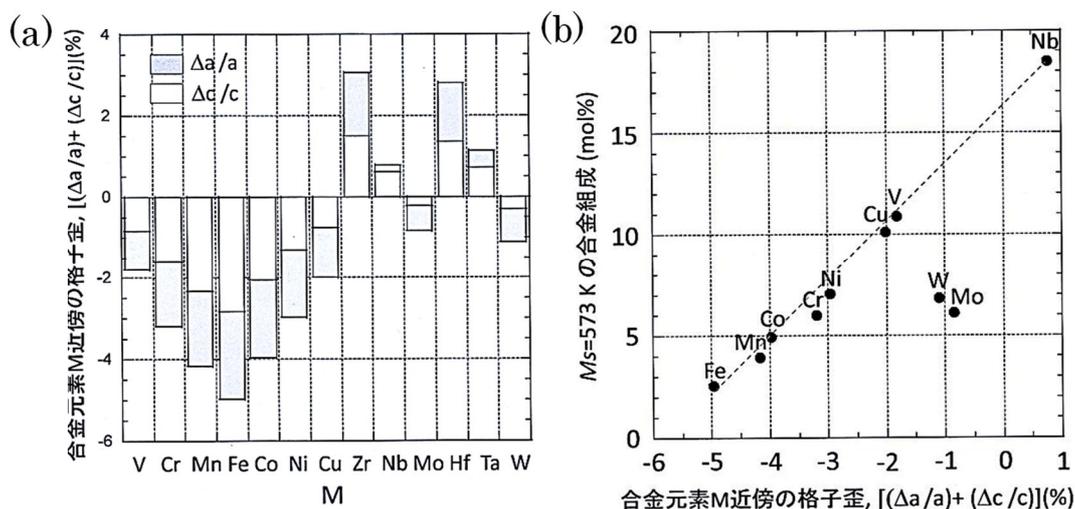


図 3 (a) hcpTi 中の合金元素 M 近傍の格子歪と(b)Ms=573K の合金組成と格子歪の関係

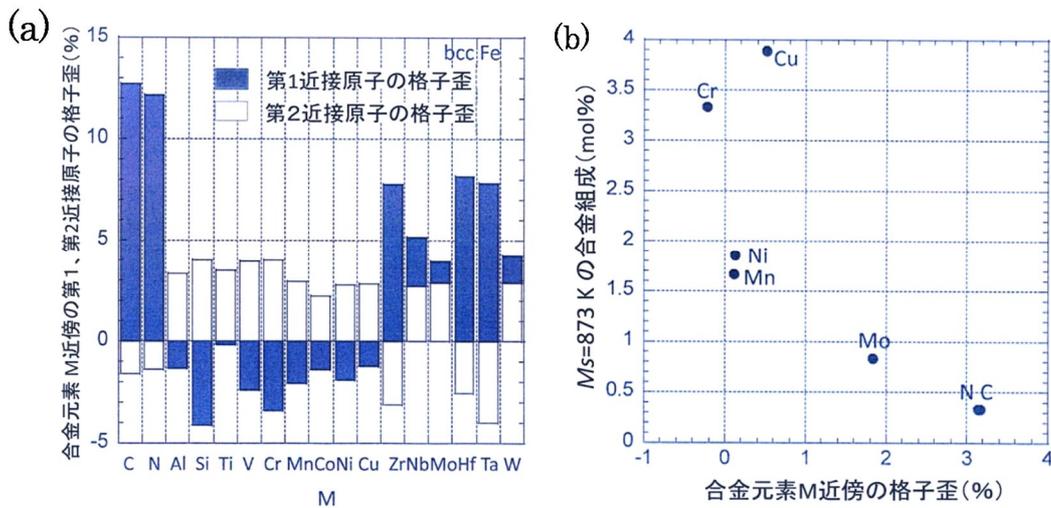


図 4 (a) bcc Fe 中の合金元素 M 近傍の格子歪と (b)  $M_s=873\text{K}$  の合金組成と格子歪の関係

図 4 (a)は、bcc Fe 中の合金元素 M 近傍の格子歪の計算結果である。縦軸は bcc 結晶中の M から第一および第二近接位置にある Fe 原子の格子歪(%)である。格子歪の大きさは合金元素 M によって大きく変化する。図 4 (b)は、マルテンサイト変態 ( $\gamma$  (fcc)  $\rightarrow$   $\alpha'$  (bcc または bct))の開始温度  $M_s$  が 873K である合金組成の実験値と、図 4 (a)に示した格子歪 (平均値) の関係を表している。2 元系 Fe-M 合金において、 $M_s=873\text{K}$  の合金組成は格子歪の増加とともに低下している。

このように、チタン合金および鉄合金の合金元素近傍に生じる局所格子歪は、マルテンサイト変態と関係している。局所格子歪は、マルテンサイト変態に必要な結晶格子の均一なシアを妨げ、変態の進行を抑制する傾向が見られる。

本研究で得られた局所格子歪を用いれば、チタン合金および鉄合金のマルテンサイト変態の開始温度  $M_s$  を制御できるので、新しい合金の設計に活用できる。

この外、合金元素に替わり、「原子空孔」の周りの局所格子歪の計算も種々な金属で行っている。原子空孔近傍の局所格子歪は、最密構造を取る fcc や hcp 金属に比べて、bcc 金属で大きい。種々の bcc 金属の中でもとりわけマルテンサイト変態や同素変態を起こす鉄やチタン中の原子空孔の周りの局所格子歪が大きいことが明らかになっている。局所格子歪が大きい bcc 金属の自己拡散係数が大きいことは、大変興味深い。

以上のように、これまで殆ど議論されてこなかった「合金元素や原子空孔の近傍の局所格子歪」は、金属・合金の物性を理解するうえで重要な情報である。

#### <引用文献>

[1] Masahiko Morinaga, A Quantum Approach to Alloy Design, Elsevier (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 森永正彦	4. 巻 72
2. 論文標題 金属中の合金元素近傍の局所格子歪と合金物性	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 豊田研究報告	6. 最初と最後の頁 115 - 127
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Morinaga, H. Yukawa, M. Yoshino	4. 巻 321
2. 論文標題 Local Lattice Strain around Alloying Element and Martensitic Transformation in Titanium Alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 WATEC Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 11009;1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1051/mateconf/202032111009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 1件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 M. Morinaga, H. Yukawa, M. Yoshino
2. 発表標題 Local Lattice Strain around Alloying Element and Martensitic Transformation in Titanium Alloys
3. 学会等名 The 14th World Conference on Titanium, Nantes, France（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Morinaga
2. 発表標題 A Quantum Approach to Alloy Design
3. 学会等名 Egypt-Japan University of Science and Technology（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森永正彦、湯川宏、吉野正人
2. 発表標題 チタンおよび鉄中の原子空孔の近傍の局所格子歪
3. 学会等名 日本金属学会春期講演大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	吉野 正人  (Yoshino Masahito)  (10397466)	名古屋大学・工学研究科・助教   (13901)	
研究分担者	湯川 宏  (Yukawa Hiroshi)  (50293676)	名古屋大学・工学研究科・助教   (13901)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------