

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：17104

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2022

課題番号：20K22470

研究課題名（和文）FCC構造を利用したチタン合金の第一原理計算による設計

研究課題名（英文）Design of novel Ti alloy with FCC phase by using first-principles calculation

研究代表者

河野 翔也（Kawano, Shoya）

九州工業大学・大学院工学研究院・助教

研究者番号：60878429

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではチタン合金におけるFCC構造の利用のために、HCPとFCC構造の積層から構成されている長周期積層構造の形成の可能性について調査した。第一原理計算を使用して、チタン合金中に添加された異なる元素による結晶構造のパラメーターとエネルギー変化を解析した。計算結果からSi, Ge, Cu, Y, Pd, Agが長周期積層構造の形成を促進する元素であることが分かった。Ti合金においてHCP構造中に上記元素がその一部に濃化したものの合成ができると、長周期積層構造の形成の可能性があることが第一原理計算を通して明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

チタン合金は航空、医療、自動車産業などで広く使用されており、その強度と耐熱性をさらに向上させることは、材料科学の進歩とさまざまな産業への応用にとって重要です。本研究により、適切な添加元素を用いることで長周期積層構造の形成が可能であることが示されました。長周期積層構造の形成はマグネシウム合金の性能を向上させる要因になっています。それがチタン合金で形成すると、既存の材料よりも高性能になることが期待されます。材料の軽量化やエネルギー効率の向上など、チタン合金の性能向上は社会的な持続可能性に寄与します。

研究成果の概要（英文）：This study investigated the potential formation of long-period stacking ordered (LPSO) structures in titanium alloys. Using first-principles calculations, the crystal structure parameters and energy changes induced by additional elements in titanium alloys were calculated. The results demonstrated that Si, Ge, Cu, Y, Pd, and Ag affected the formation of LPSO structures. It was revealed that by selectively enriching these elements in specific layers of the hexagonal close-packed (HCP) structure in titanium alloys, the formation of LPSO structures becomes possible. This investigation into the formation of LPSO structures in titanium alloys provides valuable insights for the design and synthesis of novel titanium alloys.

研究分野：材料工学

キーワード：第一原理計算 チタン 合金 添加元素 シミュレーション 積層構造

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

チタン (Ti) 合金は、その優れた性質から航空、医療、自動車産業等で広く利用されている。その Ti 合金は主に六方最密充填構造 (HCP)、体心立方格子 (BCC)、HCP+BCC の 3 種類に分類され、それぞれの結晶構造が材料の強化をもたらしている。面心立方格子 (FCC) の Ti は、高圧ねじり加工やスパッタ等の特殊な条件で形成されるという報告があるものの、FCC による Ti 合金の高機能化はまだ十分に検討されていなかった。

マグネシウム (Mg) 合金においては、FCC を含む長周期積層構造 (LPS) により従来の強度から約 2 倍になることが知られている。この LPS は HCP の一部が FCC に構造相転移することで形成される。我々は、この形成過程に添加元素が重要な役割を持つことを示し、そのメカニズムを解明してきた。

Ti は室温では Mg と同じ HCP を示し、予備的な計算では Mg と同様に長周期積層構造が高温で安定化することが確認されている。実験報告からは、Nb を添加した Ti 合金中の Ti 濃化部で長周期積層構造が形成されることが示唆されている。これらの情報から、Ti においても適切な添加元素を用いることで、FCC を含む LPS の形成が期待できると推測される。しかし、Ti の FCC に関する報告は現在まで稀で、FCC がどのような条件で形成され、どの添加元素が有効であるのかという熱力学的性質は不明である。

そこで、その解明により新規 Ti 合金の設計が可能となると考え、Ti の FCC や LPS の熱力学的性質を明らかにし、Ti 合金の強度や耐熱性をさらに向上させるための材料探索のさきがけとなるような知見を得ることを目標に研究をスタートした。

2. 研究の目的

第一原理計算を用いて Ti 合金の新たな結晶構造の選択肢として FCC の利用可能性を調査する。純 Ti や実験が行われている Ti-Nb 系、Ti-Si 系に加えて、周期表の 4 周期 Ca~Ge と 5 周期の元素 Sr~Sn を添加元素とした場合における長周期積層構造 (FCC 構造と HCP 構造が周期的に積層した構造) の結晶構造パラメーターを求め、それらが HCP から長周期積層構造を形成する際の遷移状態を解析することで、新たな添加元素の可能性を見つけ出すことを目的とする。

3. 研究の方法

1. 純チタンにおける結晶構造パラメーターを求め、HCP から長周期積層構造が形成する際の遷移状態解析を行い、HCP と長周期積層構造のエネルギー差と活性化エネルギーを算出した。
2. Ti-Nb 系と Ti-Si 系の長周期積層構造の結晶構造パラメーターを求め、HCP から長周期積層構造が形成する際の遷移状態解析を行い、そのエネルギー差と活性化エネルギーを算出した。これにより、長周期積層構造の形成に対して Nb や Si が示す影響を明らかにすることができる。
3. Nb や Si 以外の元素の探索を行い、それらの長周期積層構造の形成に対する効果を調査した。周期表の 4 周期 Ca~Ge と 5 周期の元素 Sr~Sn を添加元素とした場合の HCP から長周期積層構造が形成する際の遷移状態解析を行い、そのエネルギー差と活性化エネルギーを算出した。

第一原理計算ソフトウェアの VASP と VTST・Tools を組み合わせて実施した SSNEB (Solid state nudged elastic band) 法により遷移状態解析を行った。SSNEB 法を使用することで、原子とセルの自由度を同時に緩和させ、異なる単位胞を持つ固体間の遷移状態を計算できる。HCP 構造を初期状態、長周期積層構造を終状態とし、これらの状態間の力とエネルギーを計算し遷移状態を解析した。結晶構造モデルは先行研究 (S. Kawano et al., *Comp. Mater. Sci.*, 2020) で用いたモデルを Ti や添加元素で置換した構造を構造最適化し利用した。

4. 研究成果

1. Fig. 1 は純 Ti における HCP から長周期積層構造への遷移状態計算結果である。図中の 2H は HCP 構造、3C は FCC 構造、18R と 24R はそれぞれ周期のことなる長周期積層構造である。横軸の左端が HCP 構造であり、そこから構造が変化していく過程についてのエネルギー変化を示している。18R や 24R のような長周期積層構造の形成には 30 meV 以下の活性化エネルギーが必要であり、長周期積層構造は HCP 構造よりも 20 meV 程度不安定であることが分かった。これは Mg 程小さなエネルギーではないが、Fe の HCP-FCC の遷移状態計算結果と比較すると十分に小さなエネルギーである。このことから、長周期積層構造の形成のために必要な活性化エネルギーは低いため、Ti 系において長周期積層構造の形成の可能性があることが分かった。
2. Fig. 2 は純 Ti と Si・Nb 添加における HCP から長周期積層構造への遷移状態計算結果の比較である。Ti-Si 系では、純 Ti で見られた活性化エネルギーのようなエネルギーの上昇は確認できず、終状態である長周期積層構造は HCP 構造よりもエネルギーが低い。このことから Si を添加すると HCP 構造よりも長周期積層構造が安定化することが確認された。一方 Ti-Nb 系では、遷移過程でエネルギーが減少し、増加するという結果が得られた。これは結

晶構造を確認すると、HCP の積層が FCC の積層へ変わる際に起きる Shockley partial dislocation の関係にない別の原子・セルの変化を示していることが分かった。つまり、始状態の HCP 構造から終状態として仮定している長周期積層構造ではなく、別の構造へ変化したほうが安定であることを示唆している。Si 添加の場合、活性化エネルギーが認められないことから Ti の HCP 構造の一部に Si が濃縮すると、自発的に長周期積層構造に相転移することを示している。一方で、Ti-Nb 系では、Nb による長周期積層構造形成の可能性は否定された。このことから、実験で観測されている Si と Nb の添加による長周期積層構造の様な構造の形成には Si がエネルギー的な利得という点で関与していると考えられる。

3. 周期表の 4 周期 Ca~Ge と 5 周期の元素 Sr~Sn を添加元素とした場合の遷移状態解析を行った。その結果 Si に加えて、V, Cr, Cu, Ge, Y, Mo, Pd, Ag, Sn の 9 つの元素で HCP 構造よりも長周期積層構造のエネルギーが低いことが示された。このうち、Ge, Cu, Y, Pd, Ag が安定な経路で HCP 構造から長周期積層構造へ遷移することが確認され、これらの元素が Ti における FCC 相の利用へ向けた有望な添加元素であることが明らかになった。

以上から、Ti において上記の元素を添加した合金が長周期積層構造を形成する可能性があることが明らかになった。これは、新規 Ti 合金の開発につながる結果である。

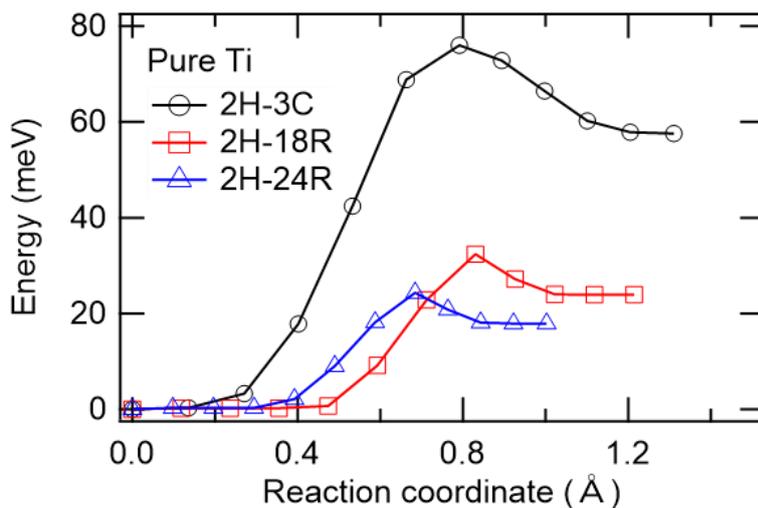


Fig. 1 純 Ti における HCP から長周期積層構造への遷移状態計算結果

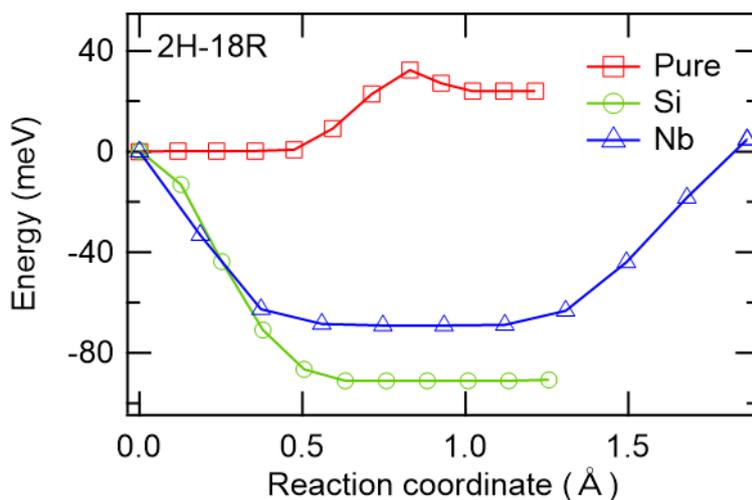


Fig. 2 純 Ti と Si・Nb 添加における HCP から長周期積層構造への遷移状態計算結果

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 河野 翔也, 飯久保 智
2. 発表標題 チタン基金金における長周期積層構造 の形成に関する第一原理計算
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋季講演大会
4. 発表年 2021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
---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------