

(699) 耐熱合金のd電子合金設計法

豊橋技術科学大学 工学部 森永正彦 ○湯川夏夫

江崎尚和

兵庫教育大学

足立裕彦

**目的** 従来の合金設計法において、脆化相(例えば $\sigma$ 相)生成予測のため、電子空孔濃度( $Nv$ )を用いた"PHACOMP"が使われてきた。しかしながら、この方法では、1)  $\sigma$ 相生成予測に合致しない合金系があり、2)  $\sigma$ 相以外の脆化相(例えば $\mu$ 相)の生成予測が困難であり、3) Ni基以外のCo, Fe基合金への適用も難しいなどの欠点がある。これらの不十分な点を解決し、かつ、オーステナイト( $\gamma$ )系耐熱合金に対して統一的に利用できるd電子合金設計法を開発したので報告する。

**方法** DV-X $\alpha$  クラスタ法に基づいて、合金中の種々の遷移金属元素15種の電子構造を計算した。用いたクラスタは[MNi<sub>12</sub>Al<sub>6</sub>]である。遷移金属元素(M)のd軌道のエネルギー準位(Md), Mと他原子間の結合力の強さを表わす結合次数, あるいはMのイオン価などの合金効果を表わす基本的なパラメーターを求め、それらを用いた合金設計について検討した。

**結果** 遷移金属のMdレベル( $e_g$ と $t_{2g}$ )がエネルギーレベル構造の中に現われる。Fig. 1にこのMdと電気陰性度の関係を、Fig. 2にMdと金属半径との関係を示した。電気陰性度と金属半径は、Hume-Rothery以来合金固溶体の古典的な取り扱いで用いられてきたパラメーターである。Mdとこれらのパラメーターとの相関は、Mdが従来の $Nv$ に替わり、 $\gamma$ 相の相安定性を表わすために使うことができることを意味している。合金において平均Mdを $\bar{Md} = \sum x_i (Md)_i$ と定義する。ここで $x_i$ はi元素の原子分率、 $(Md)_i$ はi元素のMd値である。Fig. 3に代表的3元系の1473Kにおける等温状態図を示す。 $\bar{Md} = 0.925$ の直線が点線で示した $\bar{Nv} = 2.49$ の直線に比べ、はるかに $\gamma/(\gamma+\sigma)$ 相境界に良く沿っている。Ni基のみならず、FeおよびCo基においても等Md線により種々の相境界( $\gamma/\gamma+\sigma$ ,  $\gamma/\gamma+\mu$ ,  $\gamma/\gamma+\gamma'(Ni_3Al)$ ,  $\gamma/\gamma+\beta(NiAl)$ )を統一的に表わすことができる。また、3元系のみならず、各種実用合金での脆化相の予測が $\bar{Md}$ により可能である。Fig. 4にMd値と $Nv$ 値の比較を行った。Fe, Ni, Co間の $Nv$ 値の違いは、Mdのそれに比べて大きい。Al, Siの $Nv$ 値もMd値に比べて大きい。これらの原因で従来のPHACOMPに種々の矛盾が生じたものと思われる。これら相安定性のみならず、 $\gamma$ ソルバス温度、積層欠陥エネルギーなどもMdあるいは結合次数と相関があり、これらに基づくd電子合金設計法は、新しい合金開発にヒリ有用であると結論できる。

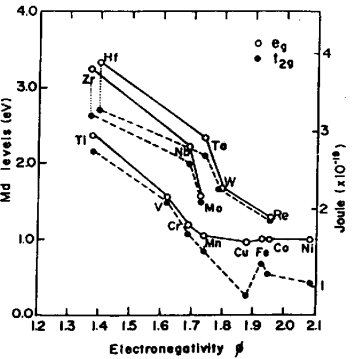


Fig.1 Md vs electronegativity.

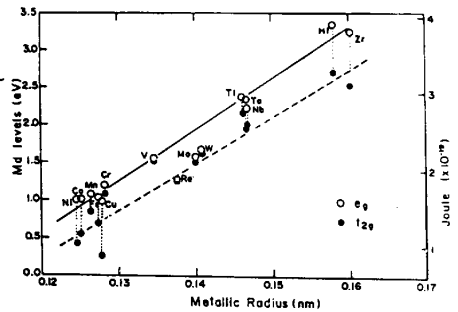


Fig.2 Md vs metallic radius.

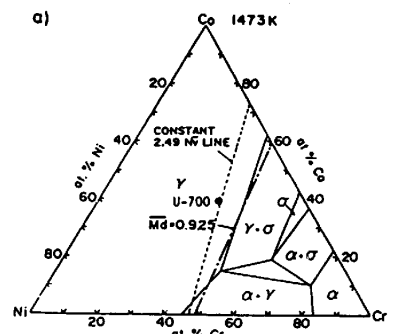


Fig.3 Ternary phase diagrams of (a)Ni-Co-Cr and (b)Ni-Cr-Mo.

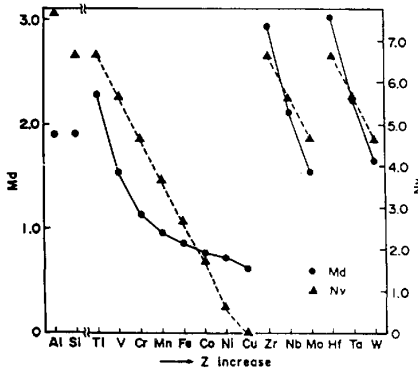


Fig.4 Comparison of Md with Nv.