

(738) チタン合金の電子論による評価 (I) 電子構造の計算

豊橋技科大 ○ 森永正彦、湯川夏夫、真屋岳良  
兵庫教育大 足立裕彦

**緒言** 合金を理解するうえで、それに含まれている金属元素の合金中における特性を知る事が重要である。そこで本研究では、hcpの $\alpha$ -Tiおよびbccの $\beta$ -Tiの中の種々の合金元素の電子状態について系統的に調べた。従来より使われている平均価電子数( $q_a$ )、金属半径、あるいは電気陰性度などに替わる各種元素の合金効果と表わす基本的なパラメーターを求めた。

**方法** 電子構造は、DV-X $\alpha$ クラスター法を用いて計算した。使用したクラスターモデルを図1に示す。 $\alpha$ -Tiでは(MTi<sub>18</sub>)クラスター、 $\beta$ -Tiでは(MTi<sub>14</sub>)クラスターを用いた。これらはいずれも、中心のM原子とそれから第1、第2近接位置にあるTi原子を含むクラスターである。ここでMは合金元素であり、14種の遷移金属と実用上重要なAl, Si, Snについて計算した。(計算法の詳細は、例えば文献(1)参照)。

**結果** 図2に $\alpha$ -Tiの結果、図3に $\beta$ -Tiの結果をそれぞれ示す。各図の(a)はイオン価、(b)は結合次数(Bond Order)である。例えば3d金属をみると、Mのイオン価は電気陰性度の順に単調に変化している。第1近接のTi(1)のイオン価は、これに対応して変化し、また第2近接のTi(2)のイオン価は正になっている。このように、最も電気陰性度の小さいTiから中心のMの方向に電荷の移動が起こっている。(b)の各原子間のd-d結合の強さを表わす結合次数の大きさは、Mによって顕著に変化している。(M-Ti)間と(Ti-Ti)間の結合次数を合わせた全体(Total)の結合次数は、 $\alpha$ -Ti、 $\beta$ -Tiとも、3d金属では、V, Cr、4d金属では、Mo, Nb, Zrが大きい。Ti-6Al-4V, Ti-13V-11Cr-3Al, Ti-15Mo-5Zr-3Alのように、チタンの実用合金は、結合次数の大きな元素を主要成分として含んでいる。

また、電子のエネルギーレベル構造の中に、中心のM原子のd軌道が関与したエネルギーレベル(Mdと略称)が現われる。Mdは周期表の元素の位置とともに単調に変化し、電気陰性度や金属半径とも相関をもつ。周知の通り、電気陰性度や金属半径は、Hume-Rothery以来、合金の相安定性の評価に用いられてきたが、Mdはこれらに替わるパラメーターである。

第1原理からの計算で求められたこれらパラメーターは、Ti合金中での合金元素の特性を適確に表わしている。

文献(1) 森永、湯川、足立：日本金属学会会報、23(1984)911.

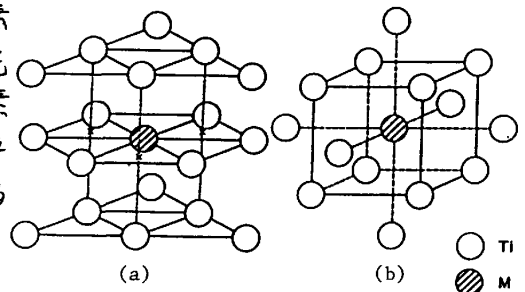


Fig.1 Cluster models used in the calculation; (a) hcp Ti and (b) bcc Ti.

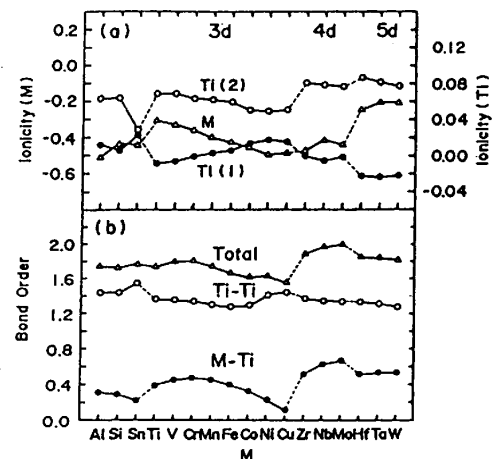


Fig.2 Change of (a) ionicity and (b) bond order with M in hcp Ti.

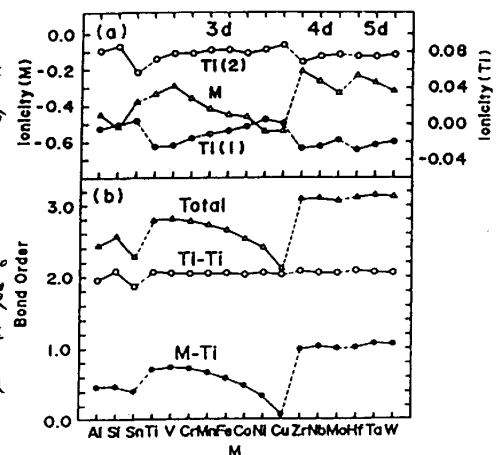


Fig.3 Change of (a) ionicity and (b) bond order with M in bcc Ti.