

(739) チタン合金の電子論による評価 (II)合金の特性評価

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 新しいチタン合金の設計と開発を行なうため、まず従来の合金を評価する。本研究では特に、チタン合金の相安定性について、(I)の電子構造の計算により求めたパラメータを用いて検討する。

方法 原子間の結合の強さを表わすパラメータである結合次数(B_0)、および合金元素のd軌道に関連したエネルギーレベル(Md)を用いる。合金において、それらの平均値をそれぞれ以下のように、 \bar{B}_0 、 $\bar{M}d$ で定義する。

$$\bar{B}_0 = \sum X_i (B_0)_i,$$

$$\bar{M}d = \sum X_i (M_d)_i.$$

ここで、 $(B_0)_i$ 、 $(M_d)_i$ はそれぞれi原子の B_0 、 M_d 値であり、 X_i は、この原子分率である。

結果 実用合金の分類 チタン合金は、 α 型(Near α も含む)、 $\alpha+\beta$ 型、および β 型の3種に大別される。図1に示すように、従来の主要合金約40種が、 \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ 線図によって明確に分離できる。 $\bar{M}d=2.35$ 、 $\bar{B}_0=2.78$ 近傍のNo.6の合金は、Ti-8Mnである。これは β 型合金であるが、 $\alpha+\beta$ 領域で熱処理を行なっている合金である。この他例えば、No.9はTi-6Al-4V、No.7はTi-6Al-6Mo-2Sn-4Zr、No.13は、Ti-6Al-2Mo-2Sn-4Zrである。

図2は、Tiに他の合金元素を入れたとき、 \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ 線図の中でどの方向に進むかを示すダイヤグラムである。これと図1と比較すれば、Al、Snが α 相安定化元素であり、Mo、Wなどは β 相安定化元素であることが分かる。

β トランザスの予測 各種3元素系合金(a-i)について、 β トランザスの整理を行なった。図3がその結果である。合金系に関係なく、 β トランザス(973~1273K)一定の曲線は、ほぼ同じ \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ 線図上にある。このことは、 \bar{B}_0 、 $\bar{M}d$ がbcc Tiの相安定性を記述するのに重要なパラメータであることを示唆している。合金組成より β トランザスの予測が可能である。

M_s 点の予測 マルテンサイト温度(M_s)の予測も、 \bar{B}_0 、 $\bar{M}d$ によりできる。この他 β -Ti中の不純物元素の拡散の活性化エネルギーは、 B_0 と相関がある。

このように、チタン合金の特性が、 Md と B_0 により定量的に評価できることが判明した。

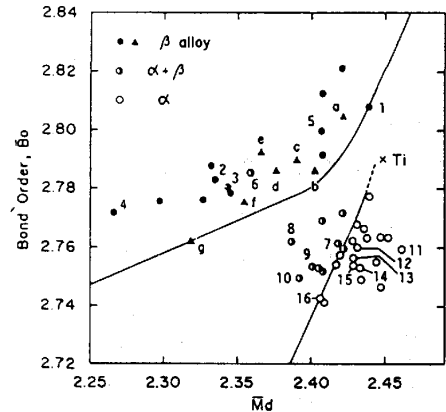


Fig.1 Classification of commercial Ti alloys in the \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ diagram.

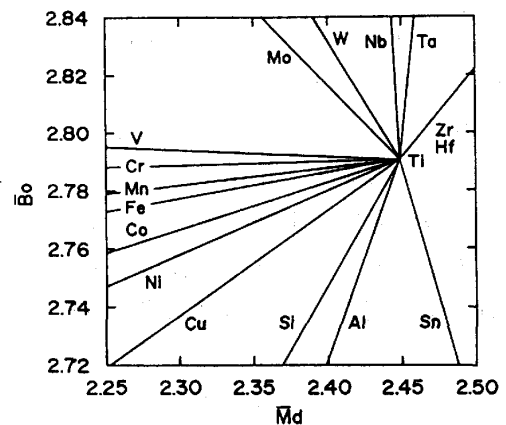


Fig.2 Location of Ti-M binary alloys in the \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ diagram.

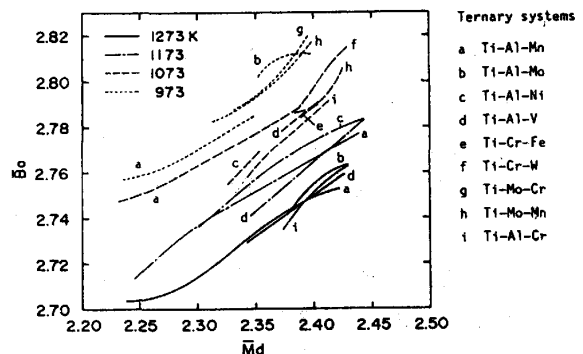


Fig.3 β -transus curves of ternary systems (a-i) in the \bar{B}_0 - $\bar{M}d$ diagram.