


専攻	材料システム 工学	学籍番号	853216	指導教官氏名	森永正彦
申請者氏名	斉藤 淳				小林俊郎、逆井基次
					新家光雄

論 文 要 旨

論文題目	金属間化合物TiAlの変形過程における電子状態
------	-------------------------

(要旨 1,200字以内)

近年、航空宇宙産業の発達とともに従来の合金に変わる新しい軽量耐熱材料の開発が望まれている。その最も有望な候補材料として、金属間化合物TiAlが挙げられる。しかしながら、TiAlは常温での低延性が実用化への大きな妨げとなっている。本研究ではTiAlの変形過程における電子状態を分子軌道法(DV-X α クラスター法)を用いて計算した。そして、その計算結果を基にTiAlの変形機構をこれまでの転位論に変わる電子論の立場から理解し、延性改善の方法を電子論的立場より探究することを本研究の目的とした。

最初に純金属のニッケルと鉄のすべり変形過程における電子構造の計算を行った。その結果から原子間の結合力を示す結合次数と0.2%耐力、引張強度は相関があることがわかった。また、原子間結合の強さと様式が材料の延性を決める因子であることもわかった。このように電子構造と機械的性質には密接な関係があることが明らかになった。

TiAlのすべり変形過程における電子構造の計算結果から、AlサイトはTiサイトに比べ、周りの原子との結合が強くなっていることがわかった。そのため、AlサイトはTiAlの変形の抵抗になっているといえる。また、TiAlの主要な結合成分であるp-d結合とd-d結合の変形過程にお

ける変化から、化学量論組成およびTiリッチTiAlでは
1/2[110]の普通転位方向に変形が起こりやすいところ
がわかった。また、AlリッチTiAlでは[101]超転位方向
への変形が可能であることが明らかになった。このことは
5 実験結果とよく一致している。さらに、合金元素の添加は
変形の抵抗になっているAlサイトへの遷移金属の添加が
有効的であることがわかった。

TiAlの双晶変形は(111)[11 $\bar{2}$]である。その双晶変形過
程における電子構造の計算結果より、すべり変形と同様
10 にAlサイトが双晶変形の抵抗になっていることがわかつ
た。また、双晶変形過程における原子間結合の変化が、
たいへん小さいため双晶変形は起こりやすい変形である
と考えられる。合金元素として遷移金属をAlと置換する
ことにより、金属的なd-d結合が変形途中で増加するた
15 め双晶変形が促進されると思われる。特にMnの添加は延
性改善に有効であるといえる。

以上のように材料の変形過程における電子状態を計算
することにより、材料の変形過程をシミュレーションす
ることができた。そして、TiAlの変形を新しく電子論的
20 立場から理解することができた。また、変形に及ぼす合
金元素の効果も明らかになった。TiAlの延性改善の方法
はいくつか挙げられるが、本研究から電子論的アプロ
チも一つの有効的な方法であるといえる。