



教授 吉見 享祐
Professor
Kyosuke Yoshimi

材料強度の原子論と格子欠陥制御工学

Atomistic of material strength and lattice defect control engineering

Weight saving and mechanical property development of materials are very important issues for the reduction of environmental burdens and the construction of infrastructure for the sustainable society. Maruyama group is challenging to create new structural materials with the viewpoint of atomistic approaches of material strength and deformation and lattice defect engineering in crystals.

究極の耐熱性を有する 超高温材料の創製と超高温特性の評価

ほとんどの原子力発電所が操業停止を余儀なくされている我が国では、電力供給の大半を火力発電に頼らざるを得ない状況になっている。しかし昨今、火力発電のための燃料調達でコスト増となり、ほぼすべての電力会社が電気料金の値上げに踏切る、もしくは検討する事態となっている。火力発電は主に、石炭を使った水蒸気タービン発電と液化天然ガスなどを使ったガスタービン発電に分けられるが、コスト増の原因は液化天然ガスにあると考えられ、ガスタービン発電の高効率化は我が国にとって今や最重要課題となっている。ガスタービン発電の高効率化には、タービン入口温度の上昇が必須であるが、高圧タービンブレードに使用されているニッケル基超合金の耐熱性が限界に達しており、現在のシステムではこれ以上のタービン入口温度の上昇は極めて困難である。そこで当グループでは一昨年来より、ニッケル基超合金の耐熱性をはるかに凌ぐモリブデン基超高温材料の開発を進めてきた。その結果、モリブデンに Mo_5SiB_2 、 $(\text{Mo},\text{Ti})\text{C}$ 、 $(\text{Mo},\text{Ti})_2\text{C}$ などを分散・複合化した新規なモリブデン合金「第1世代モシブチック合金」(Fig. 1)を開発した(特願2013-005292)。この合金の強度は従来の耐熱モリブデン合金MHCの2~3倍、

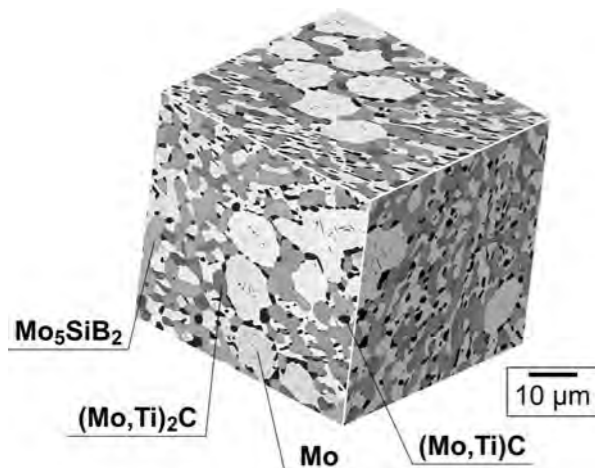


Fig. 1 3-dimensional microstructure of the Mosibitic alloy.

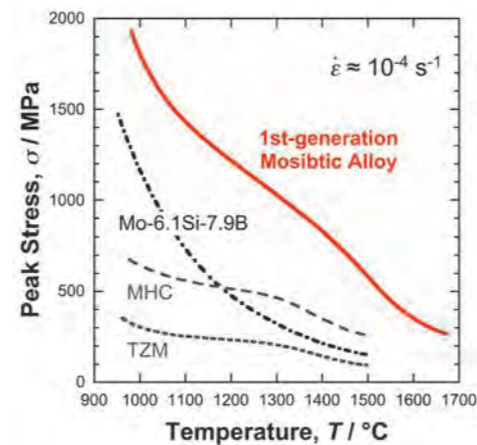


Fig. 2 High-temperature strength of the Mosibitic alloy.

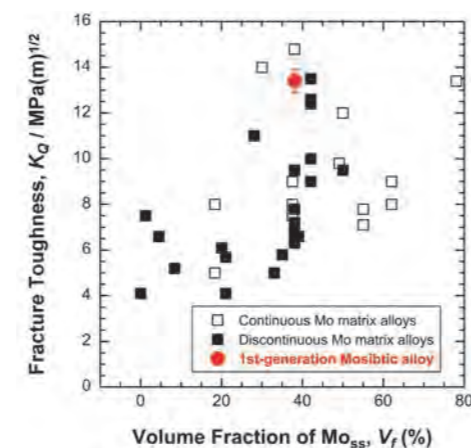


Fig. 3 Room-temperature fracture toughness of the Mosibitic alloy and comparative alloys as a function of the volume fraction of Mo solid solution.

TZMの5倍以上と極めて高強度(Fig. 2)である上、密度はニッケル基超合金と同等になるまで軽量化に成功、融点は 2000°C 以下となり溶解鑄造法で作製可能など、際立った特徴を有している。特筆すべきは、これまで Mo_5SiB_2 化合物を含有する耐熱材料の弱点であった室温の破壊靱性を大幅に改善し、目標値であった破壊靱性値 $15\text{MPa}(\text{m})^{1/2}$ を概ね達成したことである。(Fig. 3)これによって、ニッケル基超合金の耐熱性を凌ぐ新しい超高温材料の提案が現実的となり、エネルギー効率改善に向けて大きく前進した。

これらの成果は、二酸化炭素排出量削減のための新しい技術展開に寄与するとして大いに評価され、JST戦略的創造研究推進事業 先進的低炭素化技術開発(ALCA)の耐熱材料・鉄鋼リサイクル高性能材料技術領域の平成25年度提案募集に採択された。

超高温材料としてモシブチック合金の実用化を進めていくためには、モシブチック合金のさらなる性能向上が必要である。とりわけ、モシブチック合金の機械的性質には Mo_5SiB_2 化合物の果たす役割が大きいことから、 Mo_5SiB_2 化合物中の第四元素の挙動を解明することはモシブチック合金の開発には欠かせない。そこで、高分解能(HR)高角散乱環状暗視野(HAADF)走査透過電子顕微鏡(STEM)法やX線回折(XRD)法といった実験的手法と、第一原理計算による理論的手法を組み合わせ、 Mo_5SiB_2 化合物中のTiやRe原子のサイト占有挙動、またこれらの元素が Mo_5SiB_2 化合物の相安定性に及ぼす影響について詳細に調査した。その結果、TiやReは Mo_5SiB_2 化合物中のある特定のMoサイトを優先的に占有することを明らかにした。(Fig. 4)またそのことによって、Reは Mo_5SiB_2 化合物をわずかに不安定化させるが、Tiは大きく安定化させることが示唆された。

Tiが Mo_5SiB_2 化合物を安定化する機構について、結晶中の電荷の分布や状態密度をより詳細に解析した。その結果、Fig. 5に示すように、Tiは Mo_5SiB_2 化合物中のTi原子周辺の電荷密度分布を大きく変化させることによって、一部ではTi-X原子間の結合力を低下させる一方で、Mo-X原子間の結合力を高める作用があることが示唆された。この計算結果は、実験的に得られた Mo_5SiB_2 化合物中のTi

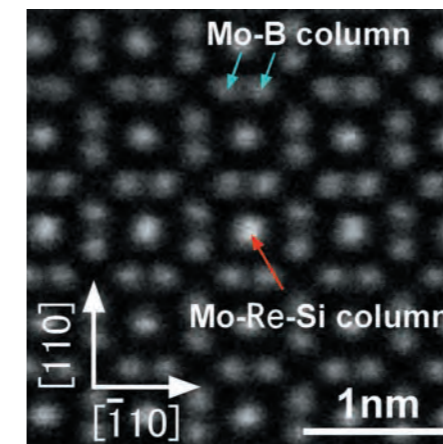


Fig. 4 HAADF-STEM image of Re-added Mo_5SiB_2 compound observed along the $[001]$ direction.

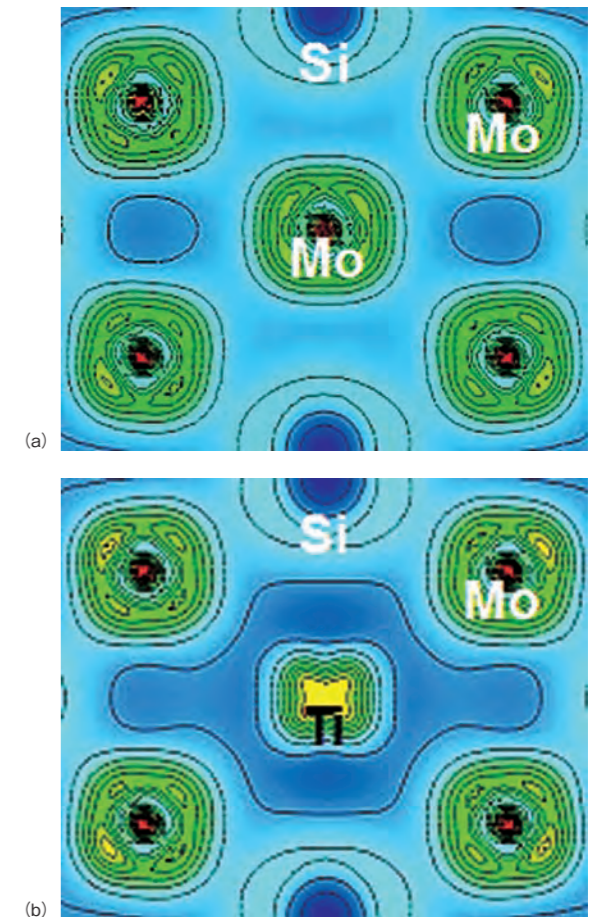


Fig. 5 Charge density distribution in Mo_5SiB_2 along the $\langle 120 \rangle$ direction. (a) Ternary system. (b) Ti-added quaternary system, where a Mo atom on the Mo-1 site is replaced by a Ti atom

による固溶強化の結果と良く一致した。以上のことから、第一原理計算手法は、次世代モシブチック合金の開発に極めて有益なツールであることが示された。

これら関連の成果は、第153回日本金属学会秋期講演大会(金沢大学)での基調講演やECI Conference on Beyond Nickel-Based Superalloys (Bad Berneck, Germany)の招待講演を通して報告されたほか、第3回3大学主催連携公開講座「グリーンライフノーションへの材料研究最前線II」(TKP ガーデンシティ仙台)で広く一般市民にも紹介された。さらに、Intermetallics 2013 (Kloster Banz, Germany)では、当グループの中村純也助教がBest Poster Presentation Awardを受賞した。また、第152回日本金属学会春期講演大会(東京理科大学神楽坂キャンパス)では、当グループの学生発表2件が第20回優秀ポスター賞を受賞した。