

(695) Ni, Co, および Fe 基オーステナイト合金の諸性質の予測

—オーステナイト系合金の d 電子合金設計法とその応用 第4報—

豊橋技科大 ○湯川夏夫, 森永正彦, 江崎尚和
兵庫教育大 尾立裕彦

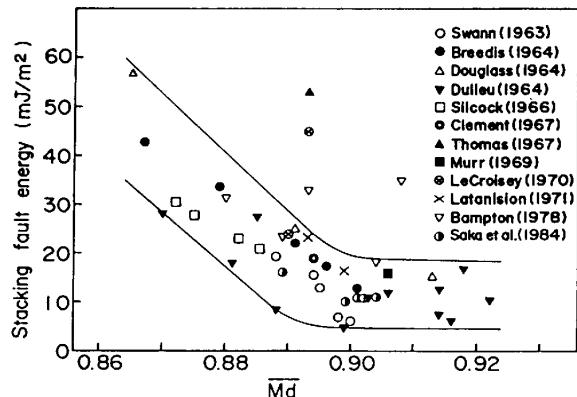
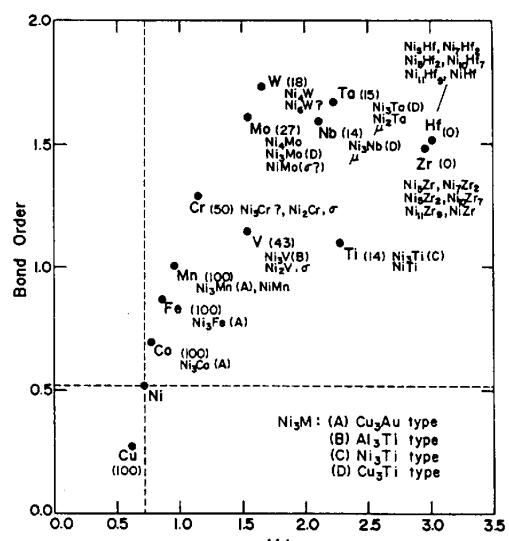
目的: 合金設計において合金の諸物性や合金相の生成挙動を正しく予測することが極めて重要である。本研究では前報に引き続き、我々が入手可能なオーステナイト系合金に関する諸性質のデータにつき、d 電子合金設計法による評価を行なった結果を報告する。

方法: 前報で求めた各パラメータのうち、遷移金属元素 M の d 電子軌道のエネルギー準位 (Md) および結合次数 (B_o) を主として用い、各種合金の固溶および時効硬化、高温腐食、ボイドスウェーリング、積層欠陥エネルギーなどの諸特性、ならびに Ni-M 二元系合金における化合物の生成傾向や FCC 相の固溶限などについて検討を行なった。なお、前報の Md と同様に $\bar{B}_o = \sum_i x_i (B_o)_i$ を定義した。ここで x_i は i 元素の原子分率、 $(B_o)_i$ は i 元素の結合次数である。

結果: 次の諸性質について評価を行なった。但し () 内には従来それらのデータの評価に用いられているパラメータを示す。1) Ni_3Al の硬度に及ぼす M の影響 (格子歪み量), 2) Ni-12 at% Al-2 at% M 合金の時効硬化量 (および μ (Ni_3Al) 相のミスマッチ量), 3) IN 738 などの Ni 基超耐熱合金の高温腐食比 ($[Al]/[Ti] \cdot [Cr]^{1/2}$, ここで [] は各元素の at%), 4) Fe-Cr-Ni 系合金の Ni イオン照射によるボイドスウェーリング量 (電子空孔濃度, Nv), 5) Fe-Cr-Ni 系合金の積層欠陥エネルギー (SFE), (Nv)。これらのうち従来のパラメータに代わり 1)~4) は \bar{B}_o で、5) は Md で評価しうることがわかった。Fig. 1 は Fe-Cr-Ni 系合金の SFE の例を示すが、数点を除きデータはせまいバンドの中に入っており、その値は、 $Md = 0.90 \text{ eV}$ でほぼ飽和することがわかる。

Fig. 2 は Ni-M 二元合金における化合物の生成傾向と 1 次固溶体の固溶限 (at%) を B_o と Md によって表示したものである。 B_o と Md が Ni より増すに従って固溶度は次第に減少し Hf や Zr では 0 になる。また大部分の合金で Ni_3M 型の規則格子や化合物が生ずるが、図の右上にゆくに従い、(A)~(D) と次第に複雑になる。また、V や Cr 以上では TCP 相の σ や μ が生成し、 B_o と Md の増加に伴なって次第に複雑ないわゆる line compound が多数生成する。一方、Ni より低い Cu では全率固溶体を作ると Ni_3Cu は生成しない。

このように遷移金属を成分とする合金の化合物の生成傾向や 1 次固溶体の固溶限は B_o と Md によって予測することができる。電子濃度 (e/a) によって電子化合物の生成を予測する Hume-Rothery 則 (1934) と対比して、我々はこれを“新 Hume-Rothery 則”と呼んでいる。

Fig. 1 Correlation of Md with SFE of the Fe-Cr-Ni and its related alloys.Fig. 2 Dependence of compound formation tendency on Bo and Md