

AM 急冷凝固環境における β -Ti 合金の空孔・ 置換元素拡散挙動解析

マテリアル生産科学専攻 マテリアル科学コース
吉矢研究室 新井 太一

1. 要約

金属チタンおよびチタン合金は、積層造形（AM）技術の観点から実用化候補材料の一つである。本研究では、レーザー溶融後の急冷凝固の要素過程を明らかにするために、分子動力学計算を行い、凝固駆動力の関数としての固液不均一界面エネルギーとその易動度を求めた。次に、結晶方位が異なる固液界面の界面易動度と界面エネルギーを用いて、フェーズフィールドモデリングによる連続体ベースのシミュレーションを行い、微細構造を注意深く調べた。その結果、置換元素の拡散が核生成頻度に大きく影響することがわかった。

2. 研究背景

3D プリンティング技術を用いた積層造形は、外形だけでなく内部の微細構造、ひいては材料特性をも調整する材料加工の新たな道を切り開いた^{[1][2][3]}。選択的レーザー溶融や粉末床溶融の場合、材料の急速な溶融と凝固が繰り返される。したがって、従来の casting や凝固の理論を 3D プリンティングに適用できるかどうかは、まだ不明である。加えて、急速な溶融と凝固は、従来の casting や凝固と比較して、巨視的なプロセスの背後にある物理的な洞察や、急速な凝固中の元素プロセスの詳細な理解を得るためのその場モニタリングの実施をさらに困難にしている。

3. 研究手法

レーザー溶融後の急冷凝固過程における β -Ti の微細構造に対する元素置換の影響を明らかにするために、分子動力学計算を行い、凝固駆動力の関数としての固液不均一界面エネルギーとその易動度を求めた。次に、結晶方位が異なる固液界面の界面易動度と界面エネルギーを用いて、フェーズフィールドモデリングによる連続体ベースのシミュレーションを行い、微細構造を注意深く調べた。

4. 結果

Cr の拡散 (Fig.1 (a)) は、拡散しない場合 (Fig.1 (b)) に比べて核生成頻度が増加することがわかった。一方、Ga の拡散 (Fig.1 (c)) は、拡散しない場合 (Fig.1 (d)) に比べて核生成頻度が減少することがわかった。この核生成頻度の変化は、固液界面近傍の置換元素の濃度分布に起因している。Fig.2 は、核成長に関する固液界面近傍の置換元素濃度分布を示している。固液界面の固体側では Cr の濃度が液体側よりも高く、固液界面の液体側では Ga の濃度が固体側よりも高いことがわかった。この結果は、固液界面近傍での置換元素の拡散が核生成の駆動力を変化させることを示している。

5. 結言

本研究から、置換元素の拡散が核生成頻度に大きく影響することがわかった。具体的には、Cr の拡散は拡散しない場合に比べて核生成頻度を増加させる。逆に、Ga の拡散は、拡散しない場合に比べて核生成頻

度を減少させる。これらの核生成頻度の変化は、固液界面近傍の置換元素の濃度分布に起因している。これらの洞察は、核成長中の材料特性に影響を与えるために元素拡散をどのように操作できるかについて深い理解を与える。Cr の濃度は界面の固体側で高く、Ga の濃度は液体側で高い。この分布は核生成の駆動力を変化させ、固液界面近傍での置換元素の拡散が核生成プロセスの制御に重要な役割を果たしていることを示している。

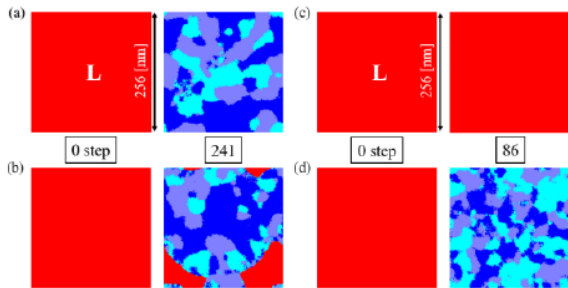


Fig. 1 連続核生成中の Cr 置換 β -Ti の微細構造。赤は液相、青は固相。(a)Cr 拡散、(b)Cr 非拡散、(c)Ga 拡散、(d)Ga 非拡散。

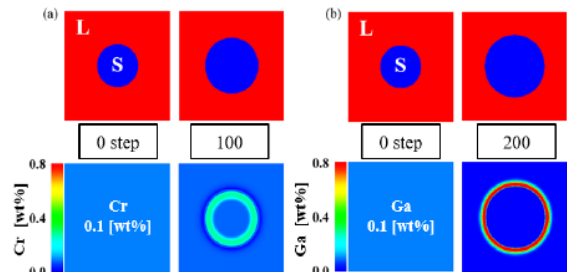


Fig. 2 核成長中の固液界面近傍における置換元素の濃度分布。(a)Cr 拡散、(b)Ga 拡散。

6. 謝辞

本研究の遂行にあたり、研究の進め方や学び方から、研究内容の深化に至るまで、惜しみないご指導と温かいご支援を賜りました大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻の吉矢真人教授に、深く感謝の意を表します。また、本研究を進める過程において、多角的かつ建設的な議論を重ねていただき、幅広い視点から丁寧にご指導と助言を賜りました九州大学大学院工学研究院材料工学部門の藤井進准教授に、心より感謝申し上げます。さらに、日々研究に専念できる環境を整え、陰ながら多大なるご支援を賜りました堀田英子様、この場を借りて深く御礼申し上げます。最後に、研究活動全般にわたり、日常的に活発な議論を交わし、共に切磋琢磨する機会を与えてくださった吉矢研究室の皆様、心より感謝の意を表します。

7. 参考文献

- [1] T. Ishimoto, K. Hagihara, K. Hisamoto, S. Sun and T. Nakano, “Crystallographic texture control of beta-type Ti-15Mo-5Zr-3Al alloy by selective laser melting for the development of novel implants with a biocompatible low Young’s modulus”, *Scr. Mater.*, 132 (2017) 34-38
- [2] B. Vrancken, L. Thijs, J.P. Kruth and J. Van Humbeeck, “Microstructure and mechanical properties of a novel β titanium metallic composite by selective laser melting”, *Acta Mater.*, 68 150 (2014)
- [3] L. Thijs, K. Kempen, J.P. Kruth and J.V. Humbeeck, “Fine-structured aluminium products with controllable texture by selective laser melting of pre-alloyed AlSi10Mg powder”, *Acta Mater.*, 61 1809 (2013)