

金材技研

科学技術庁
金属材料技術研究所

1990 No.11

ニュース

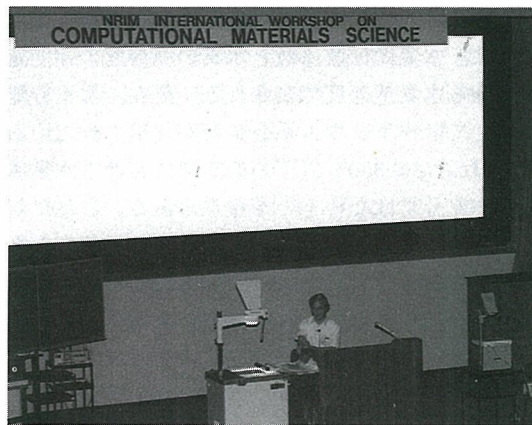
21世紀を目指すマテリアルフロント／水素精製用V合金膜／超精浄空間維持材料／傾斜機能材料の安定性／酸化物超電導体を燃焼合成

21世紀を目指す材料研究のコーディネーション —— 計算材料科学国際ワークショップを主催 ——

全く未知の物質を設計したり、新しい性質を持った材料を創製する研究には、これまでに得られているデータと経験に頼る従来からの方法だけでは不可能なものが多い。“計算材料科学”は、このような難しい材料学上の複雑な問題を、物理学や材料科学の基本法則を組み合わせ、高性能のコンピュータを駆使して解決しようという学問である。しかし、新しい研究分野であるために、世界的にみても個々の研究者レベルでの研究がようやく始まった段階にある。

新材料開発の最先端を進む当研究所は、計算材料科学の重要性に着目し、研究成果の討論や情報の交換を行う場として、国内の第一線研究者を集めた計算材料科学研究会を2年前に発足(金材技研ニュース, 1988年, No.12参照)させ、コーディネーターとしての国立研究機関の責務を果たしてきている。この研究会の活動の一環として、当研究所の主催による計算材料科学国際ワークショップが、去る8月23, 24日の両日、つくば市の研究交流センターで開催された。

今回開催された国際ワークショップには、日本、アメリカ、イギリス、およびオランダから、この分野における第一線の研究者が総勢95名参加した。会議の主題は計算材料科学の中心的研究課題であり、また昨今著しい進展を見せている次の3つの領域、(1)第1原理*からの物性の計算、(2)マイクロ組



織形成の動力学的過程のシミュレーション、(3)相の安定化の原子レベルでのシミュレーション、およびそれらの周辺の諸問題に置かれた。

(*実験データからの定数を一切使わないで物性値を求める計算手法)

これらのテーマを中心に、計算のアルゴリズム、手法、可視化技術等の新しい試みも含めて総計46件の発表があり、熱心な討論と意見の交換が行われた。また、同じ計算材料科学の分野でも専門の異なる研究者が、互に意見や情報の交換ができたことも大きな収穫であった。マテリアルフロントに位置する当研究所は、21世紀を目指した材料研究にとって不可欠ともいえるこの分野の研究を、今後いっそう押し進めることにしている。

水素分離用の高性能合金膜を開発

—— バナジウム系合金にパラジウムをめっき ——

水素は、金属中における拡散係数が炭素、窒素、酸素など他の侵入型不純物元素よりも桁違いに大きい。また、窒素や酸素が室温から中高温域において金属元素と安定な窒化物や酸化物を生成するのにに対して、水素は金属中に入り込んでも比較的容易に再放出される。こうした性質を利用して、純度99.99999%(7N)以上の超高純度水素が製造されている。

図1に示したように、金属膜の片側に不純な水素ガスを接触させ、金属膜の反対側を真空にする。そうすると、不純ガス中の水素分子は原子になって金属膜中に固溶し、固溶した水素は金属膜中を迅速に拡散して反対側に放出され、超高純度水素ガスになる。この拡散法に使用する水素分離膜の性能は、水素の拡散係数と水素の固溶度の積で定義される水素透過度で表される。現在、水素分離膜としてはパラジウム系合金膜が使用されているが、それらは約300℃以下の低温域における水素透過度が充分ではないという難点がある。これに対して、バナジウムは水素の拡散係数、固溶度ともはるかに大きく、理想的条件下では300℃以下においてパラジウムの10倍以上の高い水素透過度を示し、しかもパラジウムに比べて原料がはるかに安価である。しかし、バナジウムは水素脆性による割れを生じやすく、また、水素透過の障害となる安定な酸化皮膜を表面に生成する。このため、バナジウムは水素分離膜としては使用されていなかった。

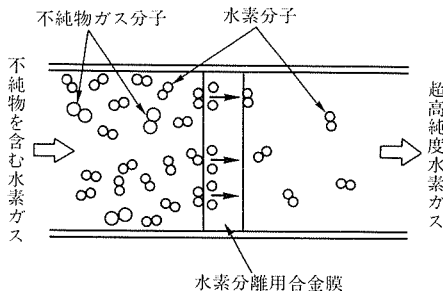


図1 拡散法による水素精製の原理図

金属中の水素の挙動に関する研究を続けている当研究所は、バナジウムにニッケル、コバルト、モリブデンなどの元素を10~30%添加すると水素脆性が改善され、しかも水素透過度はあまり低下しないことを見出した。例えば、純バナジウム膜を用いて200℃で水素透過を行うと0.1気圧程度の上流側水素圧で割れを生じてしまうのに対して、上記のバナジウム系合金膜は同じ温度で、2気圧以上でも割れを生じることがなく、高い水素透過量で使用することができる。図2は、ニッケルを15%含むバナジウム合金(V-15%Ni)の水素透過度を、純パラジウムと比較して示した図である。V-15%Ni合金は純パラジウムよりも水素透過度が大きく、特に、約200℃の低温域まで水素透過度が低下しないことがわかった。

この合金を厚さ約1mmの板とし、その表面にパラジウムをめっきして耐酸化性を持たせると、性能の優れた水素分離膜になる。当研究所が開発したこのバナジウム系合金膜を使用すると、半導体や光ファイバの生産に際して還元用あるいは加熱用として需要が高まっている超高純度水素を、高効率・省エネルギーで製造することが可能になる。

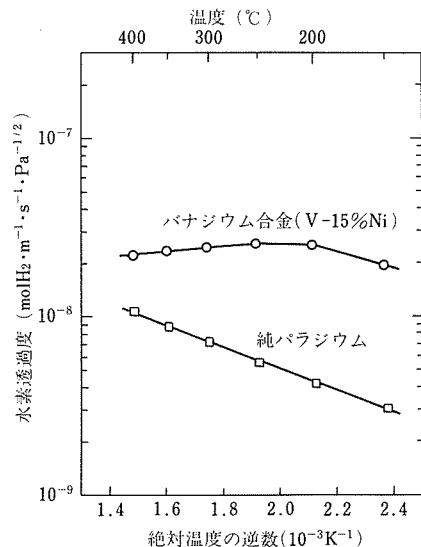


図2 バナジウム系合金と純パラジウムの水素透過度の比較

超清浄環境を実現する 新ゲッターポンプ材料

原子の並び方を思い通りにコントロールして新しい機能を持つ材料を創製するためには、圧力が 10^{-11} Pa(1億分の1気圧の1億分の1)という極低圧で達成される超清浄空間が不可欠である。当研究所は、残留ガスを吸着して超清浄環境を作るゲッターポンプに必要な、不純物ガスの排除作用の優れた材料とその製造法を開発した。

この方法では、チタン基板の上にニオブ膜を蒸着し、約500°Cに真空加熱する。基板のチタンはニオブ膜中を拡散し、酸素や一酸化炭素などを非常に吸着しやすいチタン膜が、ニオブ膜の表面に迅速に析出する。この方法によれば、チタンを蒸着する従来の方法よりもはるかに低温で、チタン膜を作製することができる。更に、このチタン膜に損傷が生じていても、約500°Cに再加熱するだけでチタン膜が再生される。

このチタン基板—蒸着ニオブ膜—析出チタン膜という三層構造のゲッターポンプ材料を用いると、表面のチタン膜に吸着された不純物ガスはニオブ膜を通してチタン基板まで拡散し、その内部に取り込まれるので、一定の排気速度を長時間維持することができる。

耐熱性が優れているチタン→炭化チタン傾斜機能材料の場合を紹介する。傾斜機能材料を蒸着する際の蒸発速度や印加電圧などを制御して炭化チタンの粒径を小さくし、その結晶方位が無差別になるようにすると、熱的安定性が高くなる。また、傾斜機能材料の構成元素との反応性が大きい基材(例えば炭素鋼)上に傾斜機能材料を作った場合には、拡散による組成の平均化が促進されるので、熱的安定性が低下するなどのことがわかった。傾斜機能材料の結晶構造の制御や基材の選択が、タービブレードなどの耐熱性向上の決め手になると思われる。

傾斜機能材料の 耐熱性向上の指針

金属からセラミックスへと組成を連続的に変化させ、耐熱性と膨張係数に傾斜を持たせた材料は、熱力学的には非平衡の状態にある。これを高温度で長時間使用していると拡散によって組成が平均化し、当初の機能が失われてくる。

当研究所では、金属から窒化物や炭化物へと組成を連続的に変化させた傾斜機能材料を金属基材上に蒸着し、実用化に際して重要なその熱的安定性、すなわち使用可能な温度や時間に及ぼす種々の影響を調べている。

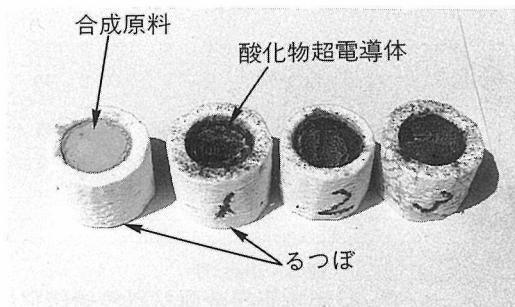
耐熱性が優れているチタン→炭化チタン傾斜機能材料の場合を紹介する。傾斜機能材料を蒸着する際の蒸発速度や印加電圧などを制御して炭化チタンの粒径を小さくし、その結晶方位が無差別になるようにすると、熱的安定性が高くなる。また、傾斜機能材料の構成元素との反応性が大きい基材(例えば炭素鋼)上に傾斜機能材料を作った場合には、拡散による組成の平均化が促進されるので、熱的安定性が低下するなどのことがわかった。傾斜機能材料の結晶構造の制御や基材の選択が、タービブレードなどの耐熱性向上の決め手になると思われる。

酸化物超電導体の 燃焼合成に成功

化合物を構成する元素間の反応熱を利用する燃焼合成法は、非酸化物系化合物の合成には非常に有効な手段(前号参照)である。しかし構成元素の1つが酸素の場合には、固体原料の周囲に十分な量の酸素ガスが存在しないため、反応が不完全になるので燃焼合成が困難であった。

当研究所は、酸素ガスが原料粉末中に浸透するように工夫して、このたび酸化物超電導体の燃焼合成に成功した。この方法では、酸素ガスを通するつばに原料粉末の混合物を入れ、高圧

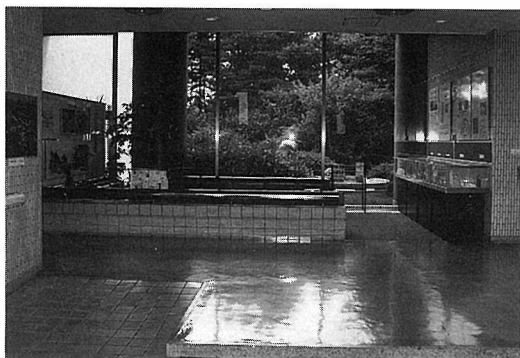
酸素中で燃焼合成する。反応は迅速で、30g程度の材料の合成は数分間で完了した。



燃焼合成したイットリウム系酸化物超電導体とその原料

トピックス

筑波支所の展示コーナーを拡充



研究本館玄関から見たラウンジ

当研究所筑波支所では、支所における研究活動の概要を来訪者に御理解いただくために、展示コーナーを研究本館ラウンジに設置していますが、このたび、その内容を充実させました。

パネルによる当研究所の概況説明のほか、炭素繊維/SiC複合材料やNb₃Al超極細多芯線など、支所各研究部・研究グループのおもな研究成果が、実物試料で紹介されています。

また、平成5年度に予定されている本所（東京・目黒）のつくば市への全面移転に備えて建設準備が進められている新設棟の、イメージスケッチも展示されています。

12月の研究発表（国内分）

学・協会名	開催期間	発表題目	発表者(所属)
先端材料の高温腐食に関するワークショップ (東京：東工大)	12. 5～12. 7	1. Characterization of Corrosion of Solid Metals in Flowing Liquid Metals	鈴木 正(力学)ほか

◆ 短 信 ◆

●外国人研究員の受入れ

氏 名 Jhon. L. McCarthy
所 属 アメリカ カリフォルニア大学

テーマ 超電導材料データベースシステムのプロトタイプの開発

期 間 平成2年9月28日～平成2年10月17日

●海外出張

氏 名	所 属	期 間	行 先	用 務
大橋 修	組織制御研究部	2. 9. 16～2. 10. 25	ドイツ, イギリス, フランス	界面の創製, 界面の分析法及び直接観察法の研究動向調査
熊倉 浩明	第1研究グループ	2. 9. 16～2. 9. 30	アメリカ	日米超電導ワークショップにおける講演及び研究動向調査
下田 正彦	基礎物性研究部	2. 9. 18～3. 9. 16	スイス	光電子分析法を用いた物質研究及び逆光電子分光の装置設計と計測技術修得
竹内 孝夫	第1研究グループ	2. 9. 22～2. 10. 1	アメリカ	1990年応用超電導国際会議
山縣 敏博	材料設計研究部	2. 9. 22～2. 10. 4	ベルギー, イギリス	第4回発電工学用耐熱材料に関する国際会議
田中 千秋	環境性能研究部	2. 9. 22～2. 9. 30	フランス	第4回ISO(材料試験関係)国際会議
西村 睦	機能特性研究部	2. 9. 26～3. 9. 25	アメリカ	原子炉材料中の水素の挙動に関する研究
長井 寿	第1研究グループ	2. 9. 29～2. 10. 10	アメリカ	日米核融合研究者交流

通巻 第383号

発行所 科学技術庁金属材料技術研究所
〒153 東京都目黒区中目黒2-3-12
TEL (03)719-2271, FAX (03)792-3337

平成2年11月発行

編集兼発行人 真 鍋 烈
印刷 株式会社 三 興 印刷