

二国間交流事業 共同研究報告書

平成24年 4月10日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

共同研究代表者所属・部局 九州大学・総合理工学研究院

職・氏名 ^(ふりがな) 准教授・波多 ^(はた さとし) 聰

1. 事業名 相手国 (インド) との共同研究 振興会対応機関 (DST)

2. 研究課題名 規則合金および金属間化合物材料の新規応用を目指した研究開発

3. 全採用期間

平成22年6月1日～平成24年3月31日 (1年10ヶ月)

4. 経費総額

(1) 本事業により執行した研究経費総額 2,000,000円

初年度経費 1,000,000円、 2年度経費 1,000,000円、 3年度経費 0円

(2) 本事業経費以外の国内における研究経費総額 100,000円

5. 研究組織

(1) 日本側参加者（代表者は除く）

氏名 <small>(ふりがな)</small>	所属・職名	研究協力テーマ
中野 貴由 <small>(なかの たかよし)</small>	大阪大学・教授	(Al, Ga)Ti 合金の長周期規則化
西田 稔 <small>(にしだ みのる)</small>	九州大学・教授	Ti 合金におけるオメガ変態
池田 賢一 <small>(いけだ けんいち)</small>	九州大学・助教	Al 合金のナノ析出
萩原 幸司 <small>(はぎはら こうじ)</small>	大阪大学・准教授	Ni 基合金の短範囲規則構造と塑性変形挙動
光原 昌寿 <small>(みつはら まさとし)</small>	九州大学・助教	Ti 合金におけるオメガ相の構造解析

(2) 相手国側研究代表者

所属・職名・氏名

Bhabha Atomic Research Centre・Scientific officer・Ulhas D. Kulkarni

(3) 相手国参加者（代表者は除く）

氏名	所属・職名（国名）	研究協力テーマ
Ashok Arya	Bhabha Atomic Research Centre・ Scientific officer (India)	合金の相平衡の第一原理計算
Gautam K. Dey	Bhabha Atomic Research Centre・ Scientific officer (India)	Ti 合金のオメガ相の微細構造および安定化機構

6. 研究実績概要（全期間を通じた研究の目的・研究計画の実施状況・成果等の概要を簡潔に記載してください。）

【研究目的】

新規金属材料の創製と材料特性評価ならびにナノスケール微細構造の評価で実績を有する九州大学および大阪大学の研究者と、インドを代表する研究機関 **Bhabha Atomic Research Centre** の金属材料研究者が、エネルギー・環境問題の解決に資する先進金属材料の共同研究の基盤を築くことを目的とした。

【研究計画の実施状況・成果】

日本側は電子顕微鏡観察、力学試験等の実験を主体に行い、インド側は第一原理計算、モンテカルロシミュレーション等の計算を主体に行った。約半年ごとに日本側あるいはインド側から1～2週間、相手国を滞在し、双方の研究結果について議論を行った。具体的な内容を以下に述べる。

・Al-rich Ti-Al 合金の長周期規則化機構と相平衡の解明（完了）： Al_5Ti_3 、h- Al_2Ti 、r- Al_2Ti 、 Al_5Ti_3' 、 $Al_{11}Ti_7$ 、 Al_3Ti_2 、 Al_3Ti の相安定性の組成・温度依存性を、原子間結合力の観点から統一的に明らかにした。また、 Al_5Ti_3 型逆位相ドメインの形態が、実験的に観察されているファセット型から曲線型へと転移する温度が存在することを、イジング・モンテカルロシミュレーションから見出した。

・(Al, Ga)Ti 合金の長周期規則相とその安定性（8割完了）：Al-Ga-Ti 三元系における各種長周期規則相の形成条件（熱処理温度・時間、組成）を明らかにするとともに、これら長周期規則相の安定化機構を Al-Ga-Ti 原子間結合力の観点から統一的に明らかにした。

・Ni 基合金の短範囲規則状態とその塑性変形挙動への影響（7割完了）：Ni-W 合金の短範囲・長範囲規則状態をエネルギーフィルター電子顕微鏡法により観察し、よく知られている Ni-Mo 合金との相違点を見出した。また、Ni-Cr 合金の短範囲規則状態が影響すると考えられる塑性変形挙動の温度依存性を明らかにし、実験的な解明が困難な Ni-Cr 合金の短範囲規則状態の理論的検討の必要性を示した。

・Ti 基合金におけるオメガ相の微細構造と安定性（5割完了。終了後も継続）：オメガ相の結晶構造（原子位置）の合金元素依存性を第一原理計算により明らかにした。現在、理論計算の結果を高分解能電子顕微鏡観察により検討中であり、一部、理論と実験の良い一致を確認した。

・Al-Mg-Si 系合金におけるクラスターの微視的構造と生成機構（5割完了。終了後も継続）：Mg、Si および空孔の集合体であるクラスターの原子レベル構造の時効条件依存性を電子顕微鏡観察と力学試験より明らかにした。現在、第一原理計算等により、クラスターの原子レベル構造と安定性の解析を進めている。