

析出相結晶構造を考慮した高強度銅合金設計

Design of High Strength Copper Alloys Based on the Crystal Structure of Precipitates

藤原 英道*
Hidemichi Fujiwara

概要 析出硬化型銅合金において、析出相となり得る元素や化合物相を計算により結晶データベースからピックアップし、合金設計を進める手法を見だし、実験による計算結果の検証を行った。計算によりピックアップされた化合物が時効過程で析出する合金においては、計算に従い予測された晶癖面上に析出し、明確な析出硬化挙動を示すことが判った。固体強度学的な考え方と組み合わせることにより、時効後の強度的な予測も可能であり、析出相つまり合金系の選定から時効後の強度的な設計を一貫してできる見通しが得られた。

1. 緒言

近年、析出型銅合金が高強度導電材料用途に用いられるようになり、合金開発に対する動きが活発化してきた。その中で、より高強度の銅合金がニーズのひとつとして求められるようになってきており、多くの析出型合金が開発されてきた¹⁾。従来、合金開発に対してなされてきた取り組みは、合金状態図によって得られる析出成分固溶限の温度依存性に基づき、合金系を選定し、実験的に特性を評価することによって、合金成分を決定することが一般的であり、合金強度を決定づける析出相の結晶構造、析出状態自体に注目してなされた合金設計は少ないのが現状である。また、実際には実験的な手法を用いたアプローチによって合金系を選定する場合、3元系合金で2400通り以上の組み合わせがあり、さらに、組成最適化を行う手順を考えると、最適な合金系の選定は実質上不可能と考えられる。

そこで、数多く存在する合金系組み合わせの中から新しい合金系を選定するための手段として、析出硬化に寄与する析出相の結晶構造に注目し、析出強化相として存在しうる合金系の選定および析出相存在状態ならびに析出強化能の予測を進めている²⁾。本手法は、強化相として生成する結晶の構造ならびに、その体積分率の予測が可能な状態図計算との組み合わせによって、合金設計の机上検討が可能となると考えられる。以下、その手法、解析結果ならびについて示す。

2. 実験および解析方法

2.1 母相中での析出相存在状態の予測計算法

母相中での析出相存在状態は、析出相のサイズ、分布密度および析出相と母相との界面状態によって特徴づけることができる。析出相サイズおよび分布密度は合金成分濃度および時効条件によって決定されるため、合金設計における合金系の選定では、むしろ析出相と母相の界面状態が重要なパラメータとなり、母相と析出相との間の晶癖面に注目する必要がある。

晶癖面の計算を行う場合の条件として、晶癖面における原子配列周期が、析出相と母相との間で一致していることが必要条件となるが、界面の安定性まで踏み込んで考える場合には、晶癖面上での原子結合状態つまり化学的界面エネルギーの大きさと母相および析出相のミスフィットにより生じる歪みエネルギーに注目する必要がある。しかしながら、界面エネルギー値を低く保つためには、原子配列周期の一致は最低限満たされなくて条件となるため、母相と析出相との間に晶癖面が存在しうる化合物を選定する場合には、必要条件として原子配列の整合性に注目すればよいと考えられる。

次に、化合物側の結晶構造に注目すると、母相である銅の結晶対称性から考えて、比較的対称性の高い結晶系に限定され、(1)立方晶(cubic)、(2)正方晶(tetragonal)、(3)斜方晶(orthorhombic)、(4)六方晶(hexagonal)の結晶系において整合性が得られやすいと考えられるため、4つの結晶系より析出強化相になり得る化合物を選定する。

2.1.1 立方晶における考え方

立方晶系の析出相を考えた場合、母相と同じ結晶系であるために、基本面同志の方位関係が $(001)_{Cu} // (001)_{p.t.}$ 、 $[100]_{Cu} // [100]_{p.t.}$ で存在すると考えられる。その場合、①析出相の構造の基本が面心構造であること、②析出相の格子定数が母相の整数倍に近い(ミスフィット $|\delta| < 4\%$)ことが必要と考えられる。その関係を式で示すと式(1)のようになる。

$$a_{p.t.} = \{a_{Cu} (1 + \delta)\} \cdot n \quad (1)$$

ここで、 $a_{p.t.}$ は析出相の格子定数であり、 a_{Cu} はマトリックスである銅の格子定数、 n は整数である。

2.1.2 正方晶および斜方晶における考え方

晶癖面を求めるには、その面に含まれる母相側の2つの方向ベクトルの決定が必要であり、析出相の基本面間隔の単位ベクトルと母相側の界面に含まれる方位ベクトルにおいてフィッティング計算を行う手順を伴う。その手法を模式的に示したのが図1である。計算手順の詳細を示すと以下のようになる。

* 研究開発本部 環境エネルギー研究所

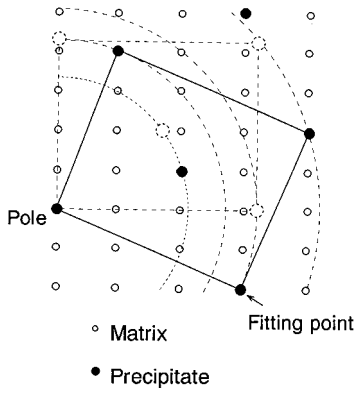


図1 晶癖面を決定する方法を表した模式図
中空丸印は、マトリックスの原子位置、中実丸印は析出相の原子位置を表す。
Schematic expression of the method to determine habit planes. Blank circle and solid circle show the atomic position of matrix and precipitate, respectively.

- ①化合物の少なくともひとつの格子定数が母相のある面間隔の整数倍に近いこと(ミスフィット $|\delta| < 4\%$)が必要であり、その条件を満たす面に垂直な方向ベクトルと化合物相のひとつの格子軸を回転軸(pole)とする。この時点で、晶癖面に含まれる母相側の1つのベクトルが決定される。
- ②上記した母相面上に存在する原子のひとつを原点とした回転軸(例えば化合物のa軸)を中心として化合物の単位胞を回転させた時に、化合物相のその他の格子点(例えばbもしくはc軸上の原子点)が母相の低指数面に存在する原子点と一致もしくは非常に近い(ミスフィット $|\delta| < 4\%$)とすれば、上記した化合物の2軸によって形成される面がそれぞれ母相および析出相の晶癖面となり方位関係を決定することができる。

具体的な計算式を考える場合、母相の回転軸をあらかじめ決めておく必要がある。この場合、低指数面では、界面での結合欠損が少なく、界面エネルギー的に安定であるためである。回転軸の母相の方向ベクトルとしては、無限に存在するが、指数の中に0が含まれる場合には、その垂直方向に必ず低指数ベクトルが存在するため、まず、これらを基本にして考える必要がある。上記の関係を回転軸[001]、[011]について表わすと以下のようなになる。

(i) (001)面に垂直な回転軸[001]を考える場合
方向ベクトルは、 $[a\ b\ 0] = (n_1 [0.5\ 0.5\ 0] + n_2 [0.5\ -0.5\ 0])$ のような関係で表される。

ここで、 $n_1 + n_2$ は偶数である必要がある。
原子間隔は、式(2)で計算できる。

$$d_{Cu} = d_{100} \{1/2 (n_1^2 + n_2^2)\}^{1/2} \quad (2)$$

また、フィッティングの条件は式(3)で示され、

$$a_{p.t.} = d_{Cu} (1 + \delta) \cdot n \quad (3)$$

予想される晶癖面の面指数は(b a 0)となる。

(ii) (011)面に垂直な回転軸[011]を考える場合
方向ベクトルは、 $[a\ b\ b] = (n_1 [1\ 0\ 0] + n_2 [0\ 0.5\ 0.5])$ のような関係で表される。

ここで、 n_1 は整数、 n_2 は偶数である必要がある。
原子間隔は、式(4)で計算できる。

$$d_{Cu} = d_{100} \{n_1^2 + 1/2n_2^2\}^{1/2} \quad (4)$$

また、フィッティングの条件は式(5)で示され、

$$a_{p.t.} = d_{Cu} (1 + \delta) \cdot n \quad (5)$$

予想される晶癖面の面指数は、(2b a a)となる。

上記2つの関係によって(b a 0)、(2b a a)の関係で示される面指数に属する母相面に整合な関係をもつ相の選定を行うことができる。また、先述したように、さらに高指数面について、上記関係を展開していくこともできるが、晶癖面となりうる原子面密度が、低くなるため、本報では2つの方向ベクトルに絞って解析を行った。

2.1.3 六方晶における考え方

六方晶系の場合には、方位関係は原子面積層周期および原子面密度の面から考えて、 $(111)_{Cu} // (0001)_{hex}$ となると考えられ、母相の(110)面の間隔(銅の場合0.256 nm)と化合物のa軸およびb軸の長さが近いものにおいて部分整合状態が得られる。

フィッティングの条件は式(6)で表される。

$$a_{p.t.} = \{a_{Cu}/2 [110] (1 + \delta)\} \cdot n \quad (6)$$

2.2 析出状態からの析出硬化能の解析

析出物が微細に分散し、過時効過程に至っていない場合の析出硬化は、析出によって生じる弾性歪みによって強化される場合が多く、析出物の結晶構造が母相と異なり、しかも析出相と母相の界面半整合である場合には、析出物はせん断されず転位ループを形成して析出物を通過し、析出物と整合である立方晶系の場合には転位により、せん断されると考えられるが、いずれの場合にも母相と析出相の間に存在する弾性歪みによる強化が析出強化量を決定づけていると考えられる。その場合の析出強化量はGeroldとHaberkom³⁾によって示された式(7)によって表わされる。

$$\Delta\tau \propto |\varepsilon|^{3/2} (f \cdot r)^{1/2} \quad (7)$$

ここで、 ε はミスフィット量、 f は析出相体積分率、 r は析出相半径である。

晶癖面とすべり面の関係については、析出物サイズファクタが最小となる晶癖面に垂直な方向とすべり面のなす角が最も小さくなる方向ベクトルをもつすべり系が優先的に作用すると考えられる。析出相体積分率 f は、時効過程における比抵抗変化を $\delta\rho$ とし、その時にLinde則⁴⁾等から求めることができる析出による母相中の溶質変化量を δC とすると、 $\delta C \propto \delta\rho$ であるため、上記の条件を考慮し、析出硬化量を表すと式(8)のようになる。

$$\Delta\tau \propto |\varepsilon|^{3/2} \{\delta C \cdot r_a (a/b)\}^{1/2} / \sin\theta \quad (8)$$

ここで、 a は析出相の最小長、 b は析出物の最大長、 r_a は析出物の平均半径であり、 θ は晶癖面とすべり面のなす角であり、 $\sin\theta$ が最大値となるすべり系が作用すると考えられる。また、単位析出相当りの析出硬化能は、式(8)を濃度に対して偏微分した式(9)によって与えられる。

$$\partial\Delta\tau/\partial C \propto |\varepsilon|^{3/2} \cdot \delta C^{-1/2} \cdot \{r_a (a/b)\}^{1/2} / \sin\theta \quad (9)$$

一方、実験的に求められる時効硬化による硬さ変化 δH は式(8)の $\Delta\tau$ と比例関係にあり、硬さ変化 δH を比抵抗値変化から求められる析出に寄与した溶質量 δC で割った値 $\delta H/\delta C$ が式(9)の $\partial\Delta\tau/\partial C$ と比例関係にあると考えられるため、析出硬化量および析出硬化能について、計算値と実験値を比較することができる。

3. 結果および考察

3.1 フィッティング計算による化合物選定結果

化合物の選定を行うデータベースとしてPearsonの化合物ハンドブック⁵⁾に掲載されている立方晶系, 正方晶系, 斜方晶系, および六方晶系化合物を対象としてフィッティング計算を行った。選定された化合物は, 表1に示したように立方晶系で101, 正方晶系で16, 斜方晶系で107, 六方晶系で12であり, 析出相として存在した時に, 母相との間に晶癖面が存在すると考えられる。立方晶系および斜方晶系に多いことは合金系選定を行う上で, 注目すべき点である。表2には, 上記計算結果の中から抜粋した一例を示す。化合物によっては, 複数の晶癖面が計算により選定される場合があるが, 先に述べたように晶癖面界面での原子の結合状態によって界面安定性が変化するため, 界面エネルギー的に小さくなる界面が選定される¹⁾。

表1 Pearson's handbookより抽出した化合物データにおけるフィッティング計算結果
Calculated results of the crystal lattice fitting using compound data in Pearson's handbook

Cubic	Tetragonal	Orthorhombic	Hexagonal
101	16	107	12

表2 表1に示したデータから抽出した晶癖面計算結果
A part of the calculated results of the habit planes extracted from Table1 data

Alloy	Precip.	Crystal sys.	a axis (nm)	b axis (nm)	c axis (nm)	Rot. Pole	Fitting	Habit P.
CuNiTi	Ni ₃ Ti	Hex.	0.5019	0.5019	0.8299	<111>	(110)	(111)
CuTiSi	CuTiSi	Ortho.	0.6193	3.746	0.713	<100>	(100)	(100)
	TiSi	Ortho.	0.6544	0.3638	0.499	<100>	(110)	(110)
CuCoSi	Co ₂ Si	Ortho.	0.408	0.373	0.7097	<100>	(110, 100)	(110, 100)
CuCoP	Co ₂ P	Ortho.	0.565	0.3508	0.6604	<100>	(130)	(130)
CuNiSi	Ni ₂ Si	Ortho.	0.5	0.372	0.706	<100>	(110, 100)	(110, 100)
CuNiMnP	NiMnP	Ortho.	0.595	0.3557	0.6828	<100>	(130)	(130)
	NiMn ₃ P ₂	Ortho.	0.5949	0.3486	0.6865	<100>	(130)	(130)
CuNiAl	Ni ₃ Al	Cubic	0.357	0.357	0.357	<100>	(100)	(100)

Striped area's data matched to fitting condition.

3.2 計算による晶癖面と実際の晶癖面との比較

計算によって得られた晶癖面が実際の晶癖面の整合性を確認するために, 表2に示した合金系において実際の合金の時効相との比較を行っているが, 立方晶系, 六方晶系, 斜方晶系, いずれにおいても予測結果とのよい一致が得られている²⁾。晶癖面上での原子配列の一致は, 2.1節においても述べたように晶癖面を構成する上での必要条件となっており, 化合物選定条件として有効と考えられる。

図2には, 透過電子顕微鏡観察(日本電子JEM3010 300kV)において, 斜方晶系析出相が生成していると考えられるCu-Ti-Si系, Cu-Ni-Si系, Cu-Mn-Ni-P系合金の観察例を示す。

図2は, 723 Kから773 Kの時効温度範囲で, 2 hから24 h処理を行ったものにおいて, 高分解能観察を行ったものである。予測された晶癖面の面指数は $\{0k\}$ であるため, 電子線入射方

向を[100] Cuとして, 予測された晶癖面と(010)もしくは(001)面との成す角を計算し, 観察された高分解能像と比較したものを併せて示してある。計算された面角度と高分解能像において(010)面と晶癖面のなす角度はよく一致しており, 予測計算通りの析出状態となっている。

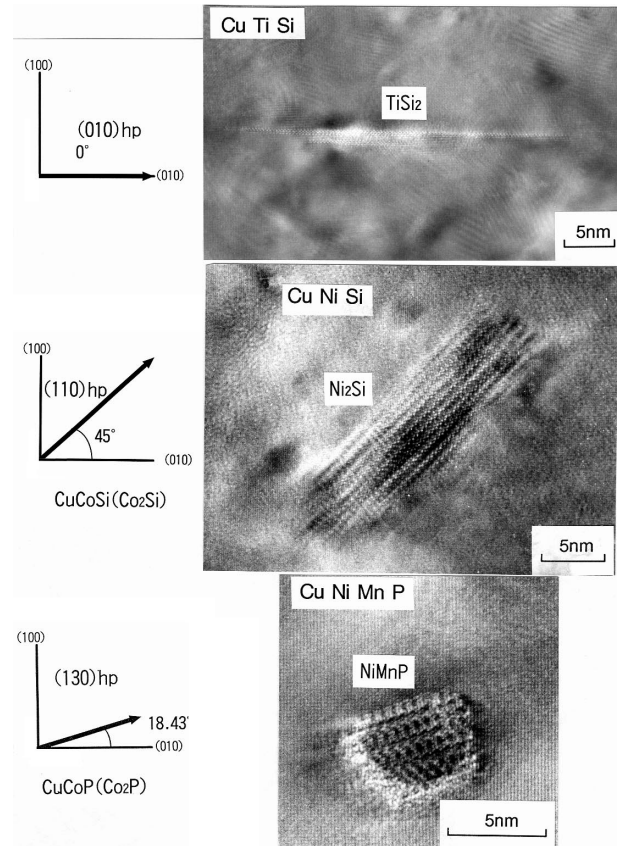


図2 各種合金の時効後における斜方晶系析出相の透過電子顕微鏡高分解能観察像
High-resolution images of orthorhombic system precipitates in various alloys after aging treatment

3.3 各化合物の析出硬化能の計算および実験による評価

2.2節において示した式(9)により各化合物の析出硬化能を評価するにあたって, 時効実験によって得られた析出硬化能 $\delta H/\delta C$ を式(9)の各パラメータの寄与度についての解析を行った。式(9)のパラメータにおいて, ①ミスフィット量 ϵ , ②析出による溶質固溶量変化 δC , ③析出相形状ファクタ(a/b), ④晶癖面と最も活動しやすい系でのすべり面とのなす角 θ を取り上げた。なお, 析出物サイズを取り上げていないのは, 表3に示したように最高硬さに到達している条件での析出相の円相当径が合金系に依らずほぼ等しいためである。図3に析出硬化能 $\delta H/\delta C$ と各パラメータの関係を示す。実験的な析出硬化能 $\delta H/\delta C$ と析出相形状ファクタ(a/b)が最も相関性が高く, しかも(a/b)が大きい, つまり粒状に近いほど析出硬化能が大きいことがわかる。また, 析出相形状ファクタは, 図4に示したように析出面における母相の原子密度に対して相関があり, 析出面における原子密度が小さいほど形状ファクタは大きく, 粒状になりやすいことがわかる。この関係を母相の原子配位数(fccは12)に対する界面での結合数の比 Z_i に対してプロットするとほぼ直線関係がえられる。

表3 表2に示した各種時効試料における実験結果のまとめ
Experimental results for various specimens shown in Table2 after aging treatment

Alloy	Crystal system	Experimental habit plane	Aging condition	Hardness change δH	Solute change δC	Precipitate diameter/ μm	Morphology factor a/b
CuNiTi	Hex.	(111)	723K-5h	96.6	2.3806	6.2	0.075
CuTiSi	Ortho.	(100)	773K-5h	54.6	1.5064	7.2	0.013
CuCoSi	Ortho.	(110)	748K-5h	149	2.4142	5.8	0.273
CuCoP	Ortho.	(130)	723K-2h	89.3	0.387	5.2	0.875
CuNiSi	Ortho.	(110)	773K-2h	130	2.4055	6.2	0.288
CuNiMnP	Ortho.	(130)	723K-2h	85	0.9227	5.6	0.72
CuNiAl	Cubic	(100)	723K-5h	23.1	0.5821	5.8	0.5

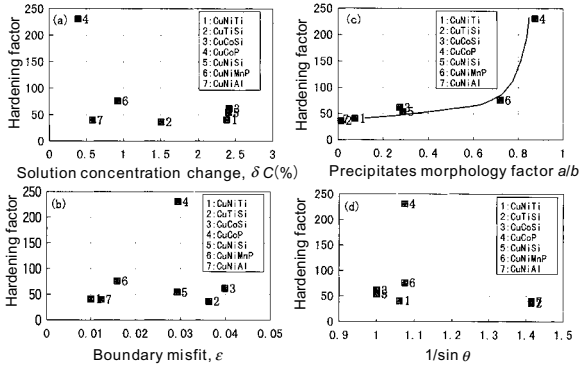


図3 析出硬化ファクターに対する各パラメータの影響；(a) 溶質固溶量変化，(b) 母相と析出相との界面ミスフィット，(c) 析出相形状ファクター，(d) すべり面と晶癖面との角度
Effects of various parameters on the precipitate hardening factors in terms of: (a) solute concentration change, (b) boundary misfit between the matrix and precipitate, (c) precipitate morphology factor and (d) angle between the glide and habit planes

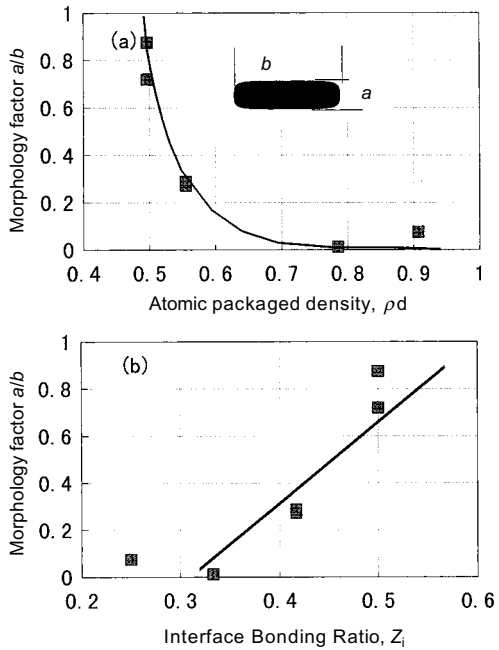


図4 析出相形状因子に対する原子配置の影響；(a) 原子充填密度，(b) 母相界面における界面結合比
Effects of the atomic arrangement on the precipitate morphology factors in terms of: (a) atomic packaged density and (b) interface bonding ratio at matrix interface

図5には、析出硬化能の実験値とパラメータの計算値を比較した結果、図6には析出硬化量の実験値と析出硬化量に比例するパラメータの計算値を比較した結果を示す。析出硬化能および析出硬化量ともに計算値と実験値に良い相関性が見られ、式(8)による析出硬化量の予測および式(9)による析出硬化能の評価に妥当性があると考えられる。ただし、六方晶系であるNi₃Ti相は、図5および図6において、各析出相の計算値と実験値の分布からは少し外れている。この原因として、斜方晶系の析出相とは異なり、晶癖面上での原子配列上、結合欠損が少ないため、規則強化⁶⁾などの異なる析出硬化メカニズムが作用していることも考えられ、析出硬化能についての比較は六方晶系の中で行う必要がある可能性もある。

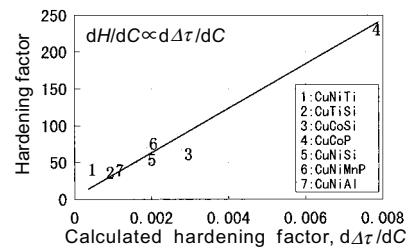


図5 実験ならびに計算によって得られた硬化因子の関係
Relationship between experimental and calculated hardening factors

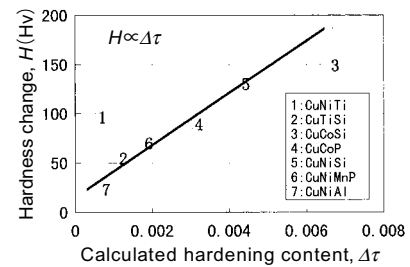


図6 実験ならびに計算によって得られた硬さ変化パラメータの関係
Relationship between experimental and calculated parameters of hardness change

以上を総合して、析出硬化パラメータ $\partial\Delta\tau/\partial C$ を結晶データより予測する式としては、晶癖面における析出物形状パラメータ (a/b) と原子結合比 Z_i がほぼ比例関係にあることを考慮すると、式(10)のようになる。

$$\partial\Delta\tau/\partial C \propto |\epsilon|^{3/2} \cdot \delta C^{-1/2} \cdot Z_i^{1/2} / \sin\theta \quad (10)$$

式(10)の関係は、晶癖面を計算によって θ , Z_i , ϵ が決定し、添加する合金量を決めれば、析出硬化能 $\partial\Delta\tau/\partial C$ が計算上求められることを示している。

3.4 析出相と母相の晶癖面を決定づける因子について

表2に示した計算結果から判るように、一つの析出相に対して、複数の晶癖面が推定される場合が存在する。原子配列周期のみに注目しただけでは、晶癖面を完全に特定化することはできないことを示している。ここでは、計算結果から晶癖面を特定化する方法について、界面エネルギーに注目して考えてみる。界面エネルギー σ を広い意味で解釈すると、化学的エネルギー σ_c と弾性歪みエネルギー σ_e によって式(11)のように表される。

$$\sigma = \sigma_c + \sigma_e \quad (11)$$

σ_c は Servi と Turnbull⁷⁾ によって式(12)のように表されて

いる。

$$\sigma_e = E_0 N_s Z_s (C - C_a)^2 / N_0 Z_L \quad (12)$$

N_s は界面単位面積あたりの原子数、 Z_L は結合に寄与する数(fccでは12)、 Z_s は界面を通しての1原子あたりの結合数であり、母相の原子密度が高い面ほど少なくなる。 E_0 は界面での平均異種原子結合によるエネルギー増加量に相当した値である。 N_0 はアボガドロ数、 C は析出物中の溶質濃度、 C_a は母相中の溶質濃度である。異種原子の結合エネルギーが負ではない限り、界面において原子結合欠損が多いほど E_0 は大きくなるとともに界面エネルギー自体も高くなり、晶癖面としては不安定となる。つまり、化学的エネルギーから考えると晶癖面での原子密度は低く、結合欠損が多いほど晶癖面は不安定化することになる。図4に析出物の形状ファクタ(a/b)と原子面密度もしくは晶癖面での原子結合率 Z_i の関係を示したが、式(12)の Z_s/Z_L は、晶癖面での原子結合率に相当していることを踏まえると、原子密度の低い面ほど、つまり、原子結合率 Z_i が大きいほど粒状化しやすい結果は、化学的な界面エネルギーの大きさによってもたらされていると考えることができる。

一方、ミスフィットにより生じる界面エネルギーの弾性歪み成分は、式(13)によって表される⁸⁾。

$$\sigma_e = \mu a (1 + \phi - (1 + \phi^2)^{1/2}) / 2\pi^2 \quad (13)$$

ここで、 ϕ は $2\pi\varepsilon/(1-\nu)$ であり、 a は格子定数、 ε はミスフィット歪み、 ν はポアソン比、 μ は母相のせん断弾性係数である。ミスフィットが大きければ界面エネルギーが大きくなり不安定することを表している。しかしながら、図3において示したように、ミスフィット量と形状パラメータとは相関性が見られないことから、化学的な界面エネルギーほど影響は大きくないと推定され、一部、実験的にも検証がなされている²⁾。

3.5 析出相結晶構造に基づく銅合金設計手法

原子配列計算および固体力学に基づく銅合金設計手法の手順をまとめると図7のようになる。

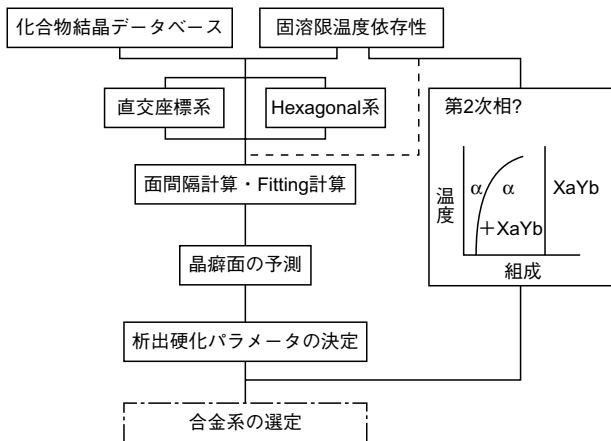


図7 析出硬化銅合金設計に関するフローチャート
Flow chart to design the precipitate hardening copper alloys

(1) 化合物データベースより、立方晶、正方晶、斜方晶、六方晶系に属する化合物データ、格子定数をピックアップする。同時に、状態図計算により、銅に対し固相温度範囲において固溶限もしくは、固溶限温度依存性のない元素で形成された化合物は除外する。

(2) それぞれの結晶系において、2.1節において示した考え方に基づき、フッティング計算を行い条件を満たす化合物の選定、と晶癖面を予測する。上記計算において、同じ化合物で、複数の晶癖面が選定される場合には、晶癖面原子密度(晶癖面での原子結合率)と原子位置より判断される結合欠損数によって絞り込みを行う。

(3) 選定された化合物の723～773 K付近での析出量 δC を実験的な測定、もしくは計算状態図によって推定し、以下に示した式(14)にて析出硬化パラメータ $\partial\Delta\tau/\partial C$ を推定する。

$$\partial\Delta\tau/\partial C \propto |\varepsilon|^{3/2} \cdot \delta C^{-1/2} \cdot Z_i^{1/2} / \sin \theta \quad (14)$$

ここで、 ε は格子ミスフィット量、 δC は析出による母相中の溶質変化量、 θ は晶癖面とすべり面のなす角であり、 Z_i は原子結合比である。

(4) 析出硬化パラメータ $\partial\Delta\tau/\partial C$ によって、合金量と析出強化量の関係が推定できるため、合金添加量とのバランスを考えながら、合金系の絞り込みを考慮することができる。

(5) 最終的には、合金系、および合金量を設計した時点で、試作による確認を行い、製造工程設計を行う。

上記合金設計過程で示した通り、析出相の固溶限の温度依存性を知ることが必要であり、計算状態図プログラム⁹⁾の活用が図ることができれば、合金系の絞り込みに必要とされる時間を大幅に低減化できる可能性がある。また、第1原理計算によって、状態図を構成する取り組みもなされており、化合物データベースの充実化とともに状態図計算の適用を進めていくことが必要である。

4. まとめ

(1) 立方晶、正方晶、斜方晶からなる直交座標結晶系、および六方晶において、Pearson's化合物データブックの結晶構造に基づく合金系の選定を行った結果、立方晶で101、正方晶で16、斜方晶で107、六方晶で12の合金系が選定された。

(2) 上記選定結果の中の一部の合金において合金試作し、析出硬化性を示した合金において方位予測結果と透過電子顕微鏡観察結果を比較した結果、良い一致が得られた。

(3) 析出硬化能 $\partial\Delta\tau/\partial C$ と析出相パラメータとの関係を調べた結果、格子ミスフィット量および析出相がすべり面のなす角度等よりもむしろ、析出面の原子面密度面(原子結合率)から決定される析出物形状の影響が見られ、以下の式によって表されることが判った。

$$\partial\Delta\tau/\partial C \propto |\varepsilon|^{3/2} \cdot \delta C^{-1/2} \cdot Z_i^{1/2} / \sin \theta$$

ここで、 ε は格子ミスフィット量、 δC は析出による母相中の溶質変化量、 θ は晶癖面とすべり面のなす角であり、 Z_i は原子結合比である。

(4) 析出相となる化合物結晶データと析出成分の固溶限変化データより、高強度を達成しうる合金系の絞り込みと析出硬化能の予測が可能であり、本報において示した手順に従って計算および一部の実験を進めることにより、従来の手法に比べて、非常に少ないステップで新しい高強度合金設計が可能であると考えられる。

参考文献

- 1) 日本伸銅協会編:銅および銅合金の基礎と工業技術(改訂版), 236.
- 2) 藤原, 里, 神尾:伸銅技術研究会誌, **37**(1998), 106.
- 3) V.Gerold and H.Haberkom: *Phy.Status Solidi*, **16**(1966), 675.
- 4) J.O.Linde:*Ann.d.Phy.*, **15**(1932), 219.
- 5) P.Villars and L.D.Calvert: *Peason's Handbook of Crystallographic Data*, ASM, **1** ~ **4**
- 6) P.Guyot: *Phil.Mag.*, **24**(1971), 987.
- 7) I.S.Servi and D.Turnbull: *Acta Met.*, **14**(1966), 161.
- 8) J.H.van der Merwe: *J.Appl.Phys.*, **34**(1963), 117.
- 9) 日本金属学会:「材料開発・設計における状態図の基礎と応用」, (1994), 93.