

拡散パラメータの確認 作業

2024 年 12 月 13 日

株式会社材料設計技術研究所

第 1 章	Ti-Al-V	Bcc 相中の拡散	(2010Wan)
第 2 章	Ti-Al-V	Hcp 相中の拡散	(2018Lin)
第 3 章	Ti-Al-Cr	Bcc 相中の拡散	(2011Li)
第 4 章	Ti-Al-Nb	Bcc 相中の拡散	作業中
第 5 章	Ti-Al-Nb	γ (TiAl)相中の拡散	作業中
第 6 章	Ti-Al-Nb	α 2 と γ 相中の拡散	作業中
第 7 章	Ti-Al-Ni	の拡散	調査中
第 8 章	Ti-Al-O	の拡散	調査中

文献に載っているパラメータには誤植が多い。そこで本書は、忠実にそのパラメータをデータ入力し、計算結果を比較してみる。

文献 2010Wan は Ti-Al-V 系の Bcc 相の拡散パラメータ (Mobility MQ パラメータ) を載せている。このパラメータを用いてデータベースファイルを作成した。100%Ti と 72.9Ti-16.2Al-10.9V (at.%) の拡散対、温度 1473 K、18 時間=64800 秒後の濃度分布を計算した結果を図 1-1 に示す。試料の長さは左右それぞれ 1000 μm とした。

計算結果は文献 2010Wan の Fig.18 と一致しない。特に接合面におけるアルミ濃度値、バナジウム濃度値が一致しない。Fig.18 の値は約 8 at%Al と約 5 at%V に読める。

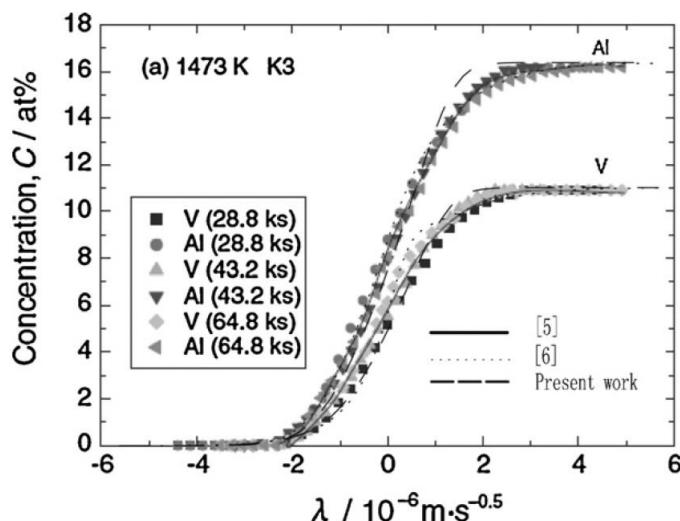


Fig. 18. The concentration profile for the diffusion couple Ti/Ti-16.2Al-10.9V annealed at 1473 K.

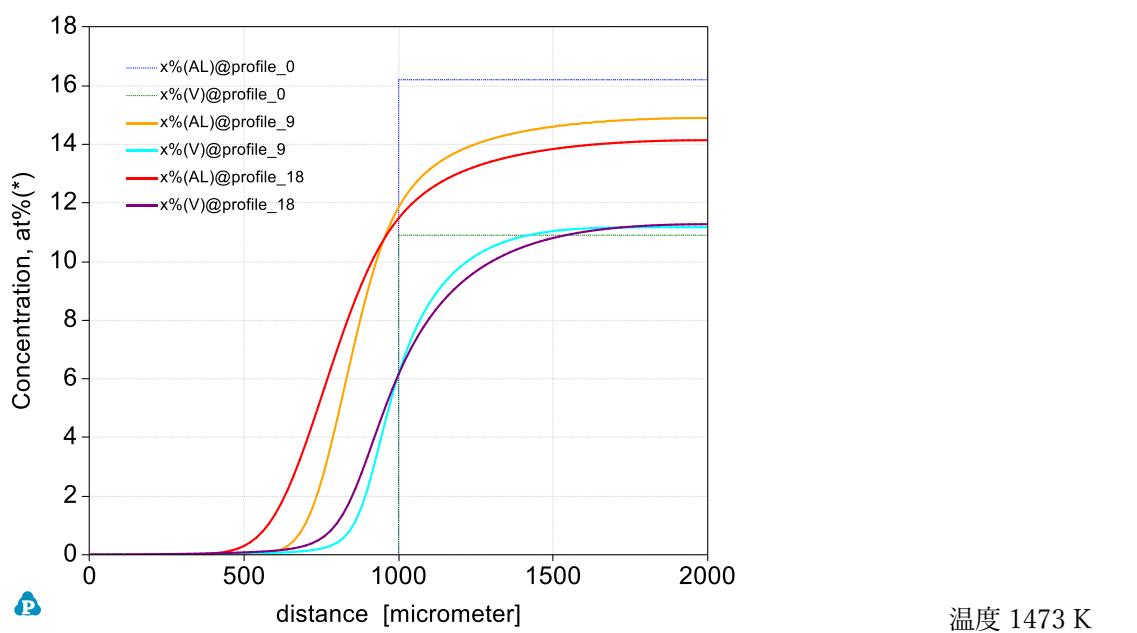


図 1-1 計算による濃度分布図

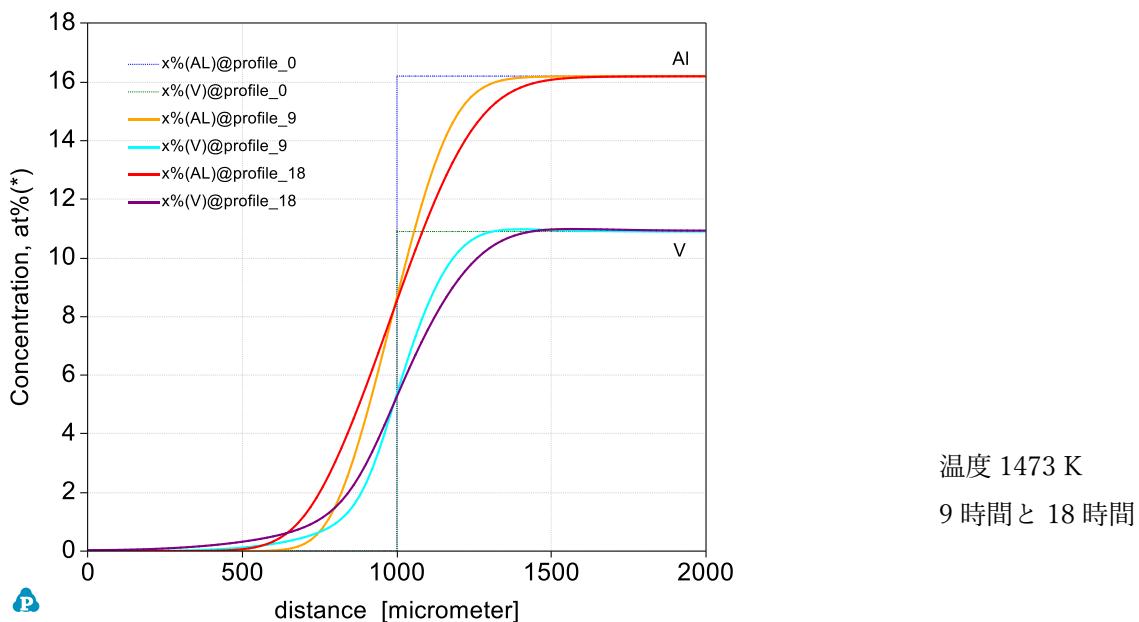


図 1-2 パラメータ修正後の濃度分布図

Bcc 相の拡散パラメータ (Mobility MQ パラメータ) 修正後の計算結果を図 1-2 に示す。文献 Fig.18 とほぼ一致した。横軸に関しては、補足説明 を参照のこと。
試行錯誤的にどのパラメータによる影響かを見極め、Al-Ti-V 3 元素間における Al の Mobility 値の小数点位置を修正した。（もしくは文字 6 を 66 とタイプミスしたと考える）

文献値

```
Para MQ(BCC_A2&AL,AL,VI,V:VA;0) +4665823.80;
```



修正値

```
Para MQ(BCC_A2&AL,AL,VI,V:VA;0) +466582.380;
```

もしくは

```
+465823.80;
```

次に、90.2Ti-9.8Al と 90.1Ti-9.9V (at.%) の拡散対、温度 1473 K、18 時間=64800 秒後の濃度分布を計算した結果を図 1-3 に示す。試料の長さは左右それぞれ 1000 μm とした。
文献 2010Wan の Fig.19 を下に示す。

β Ti(Bcc 相)中の Ti の拡散係数を図 1-4 に示す。

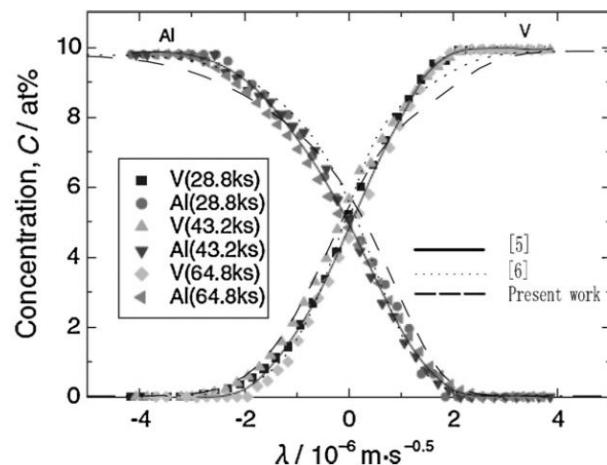


Fig. 19. The concentration profile for the diffusion couple Ti-9.8Al/Ti-9.9V annealed at 1473 K.

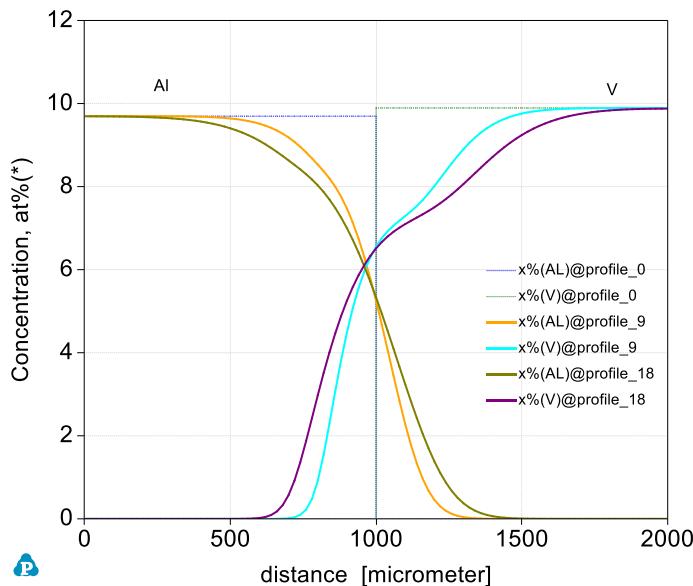


図 1-3 パラメータ修正後の濃度分布図

温度 1473K, 18 時間後

Ti-9.8Al と Ti-9.9V

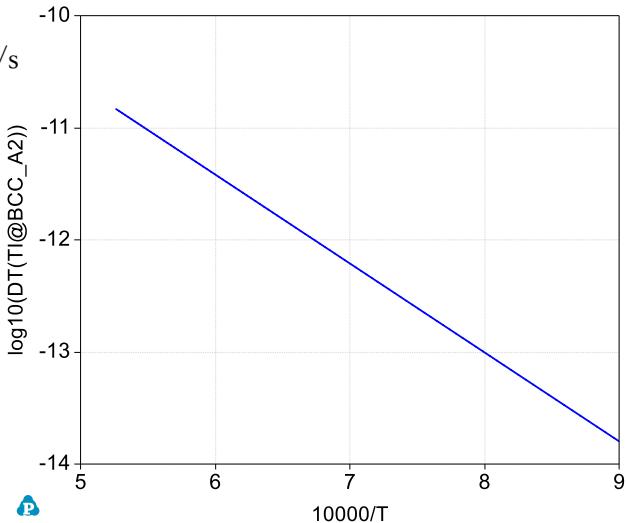


図 1-4 β Ti 中の Ti の拡散係数 (文献 2010Hua)

補足説明 :

文献 2010Wan の Fig.18 の横軸は、 $\lambda = (10^{-6})m/s^{-0.5}$ です。

$$18 \text{ 時間} = 64800 \text{ sec},$$

$$\sqrt{(64800 \text{ sec})} = 254.56$$

したがって、 $1000 \mu\text{m}$ とは、 $1000 \mu\text{m}/254.56 = 3.93E-06$ 、 $\lambda \doteq 4$ (Fig.18) の位置になる。

本文中には「The function λ given in the graphs is the normalized distance calculated by Distance / ($\sqrt{(\text{Time})}$).」と説明がある。

文献 :

2010Wan Thermodynamic and kinetic modeling of bcc phase in the Ti-Al-V ternary system.
H.Wang, N.Warnken, R.C.Reed,
Materials Science and Engineering A, 528 (2010), 622-630.

文献 2010Wan に載っていない他の拡散パラメータは、2010Hua を利用した。

2010Hua Assessment of atomic mobilities for bcc phase of Ti-Al-V system.
L.Huang, Y.Cui, H.Chang, H.Zhong, J.Li, L.Zhou,
J. Phase Equilibria, 31 (2010), 135-143.

α Ti 中の Ti の拡散係数や Al の拡散係数、 β Ti 中の Ti の拡散係数や Al の拡散係数に関する文献

2000Mis Diffusion in the Ti-Al system.

Y.Mishin, C.Herzig, Acta Mater., 48 (2000), 589-623.

第2章 Ti-Al-V Hcp相中の拡散

文献 2018Lin は Ti-Al-V 系の Hcp 相の拡散パラメータ (Mobility MQ パラメータ) を載せて いる。このパラメータを用いてデータベースファイルを作成した。93.2Ti-4.4Al-2.4V と 94.3Ti- 5.7Al-0V (at.%) の拡散対、温度 923 K、2400 時間後の濃度分布を計算した結果を図 2-1 に示す。 試料の長さは左右それぞれ $40 \mu\text{m}$ とした。図 2-1 は接合面の左右 $20 \mu\text{m}$ を表示している。 計算結果は文献 2010Wan の Fig.6 と一致しない。バナジウム濃度値が一致しない。

(左側の試料のアルミ濃度が 4.4at.%Al か？ 要調査)

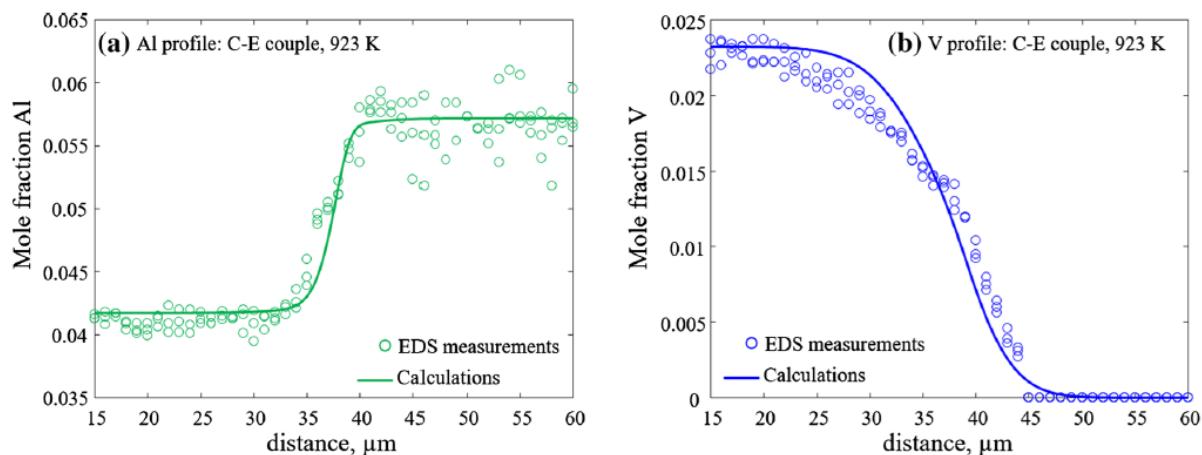


Fig. 6

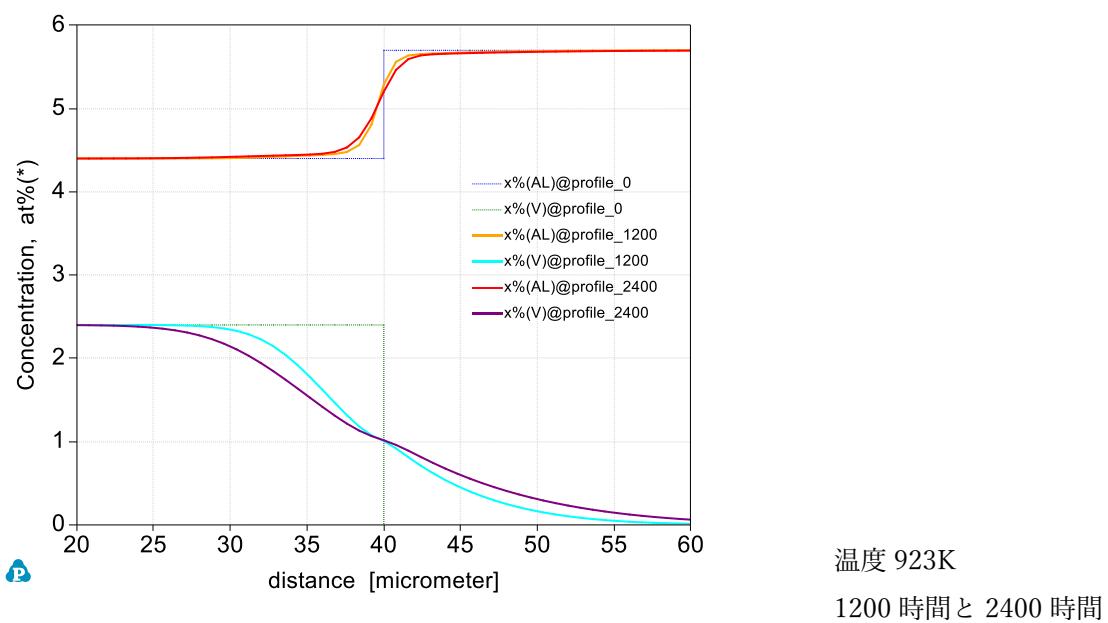


図 2-1 計算による濃度分布図

93.2Ti-4.4Al-2.4V と 94.3Ti-5.7Al-0V (at.%) の拡散対

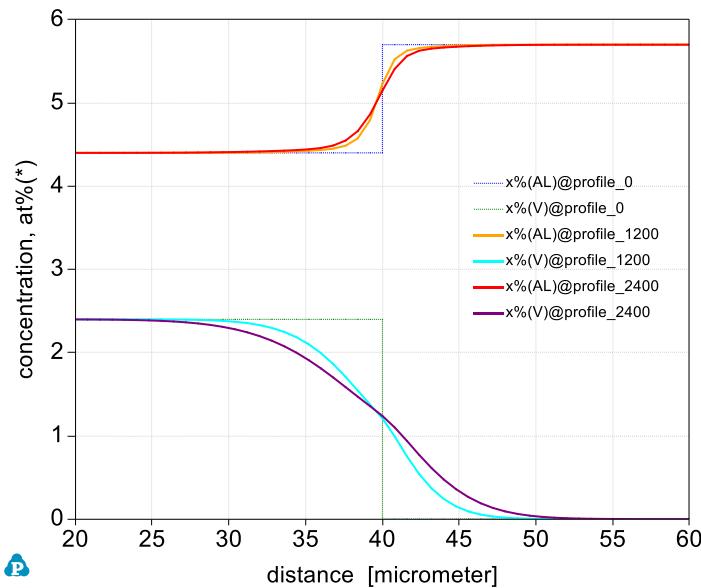


図 2-2 パラメータ修正後の濃度分布図

Hcp 相の拡散パラメータ (Mobility MQ パラメータ) 修正後の計算結果を図 2-2 に示す。文献 Fig.6 とほぼ一致した。

Al-Ti 中における V の Mobility のパラメータ定義を修正した。

文献値

Para MQ(HCP_A3&V,AL, TI:VA;0)	-130180;
Para MQ(HCP_A3&V, TI, V:VA;0)	-529600;



修正値

Para MQ(HCP_A3&V, AL, TI:VA;0)	-529600;
Para MQ(HCP_A3&V, AL, TI:VA;1)	-130180;

次に、100Ti-0Al-0V と 93.2Ti-4.4Al-2.4V (at.%) の拡散対、温度 1023 K、150 時間後の濃度分布を計算した結果を図 2-3 に示す。試料の長さは左右それぞれ $40 \mu\text{m}$ とした。

文献 2018Lin の Fig.6 (c) (d) を下に示す。

α Ti(Hcp 相)中の Ti の拡散係数を図 2-4 に示す。

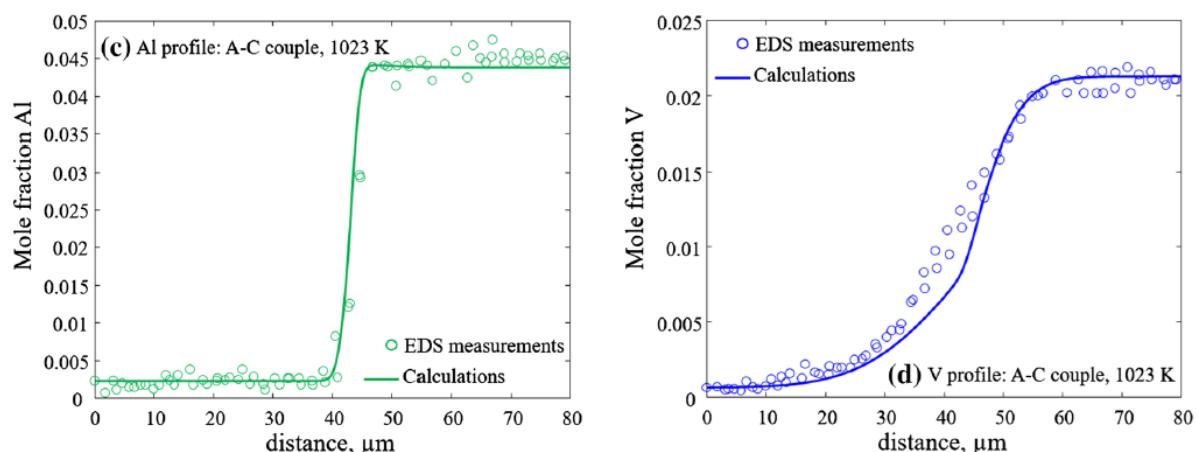


Fig. 6

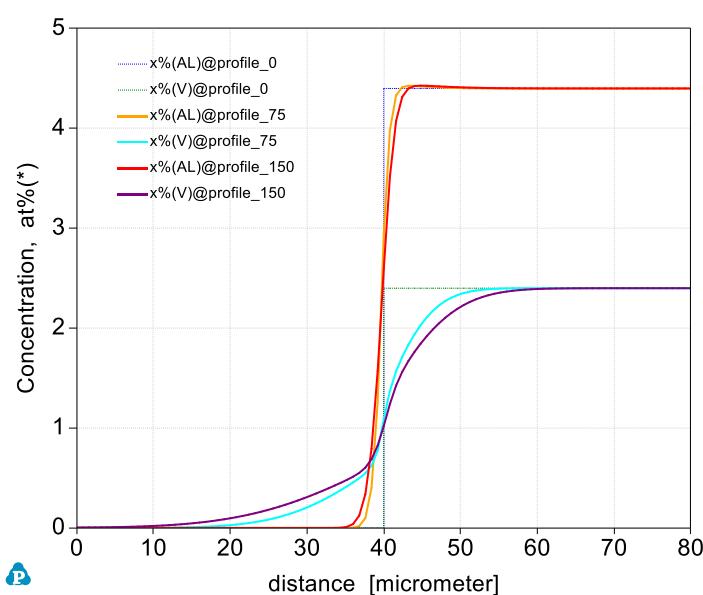


図 2-3 パラメータ修正後の濃度分布図
温度 1023K, 150 時間後
100Ti-0Al-0V と 93.2Ti-4.4Al-2.4V (at.%) の拡散対

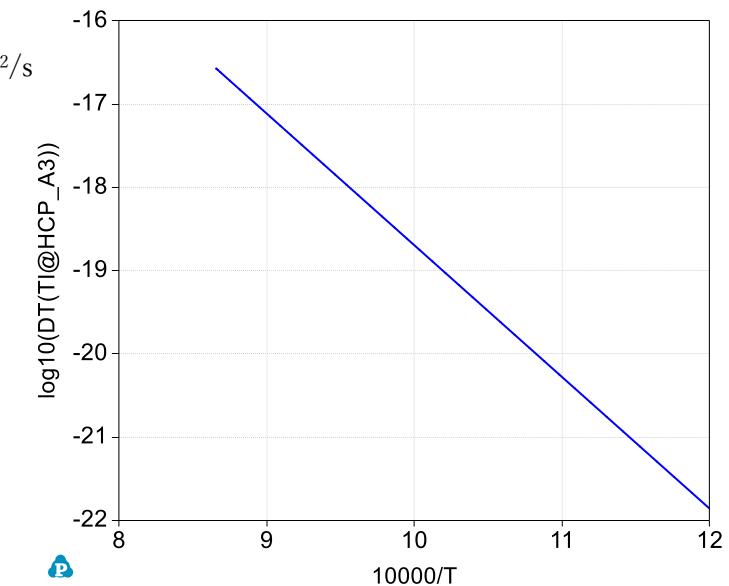


図 2-4 α Ti 中の Ti の拡散係数 (文献 2018Lin)

文献 :

2018Lin Diffusion in the Ti-Al-V system.

G. Lindwall, et al.,

Journal Phase Equilibria Diffusion, 39 (2018), 731-746.

文献 2011Li は Ti-Al-Cr 系の Bcc 相の拡散パラメータ (Mobility MQ パラメータ) を載せている。このパラメータを用いてデータベースファイルを作成した。100%Ti と 85.3Ti-7.7Al-7.0Cr (at.%) の拡散対、温度 1473 K、18 時間=64800 秒後の濃度分布を計算した結果を図 3-1 に示す。試料の長さは左右それぞれ 1500 μm とした。横軸に関しては、補足説明 を参照のこと。計算結果は文献 2011Li の Fig.7 (a) と一致した。

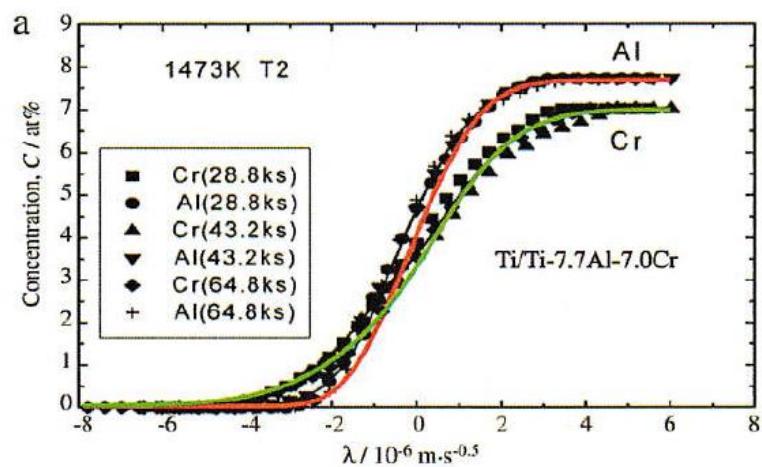


Fig. 7 (a)

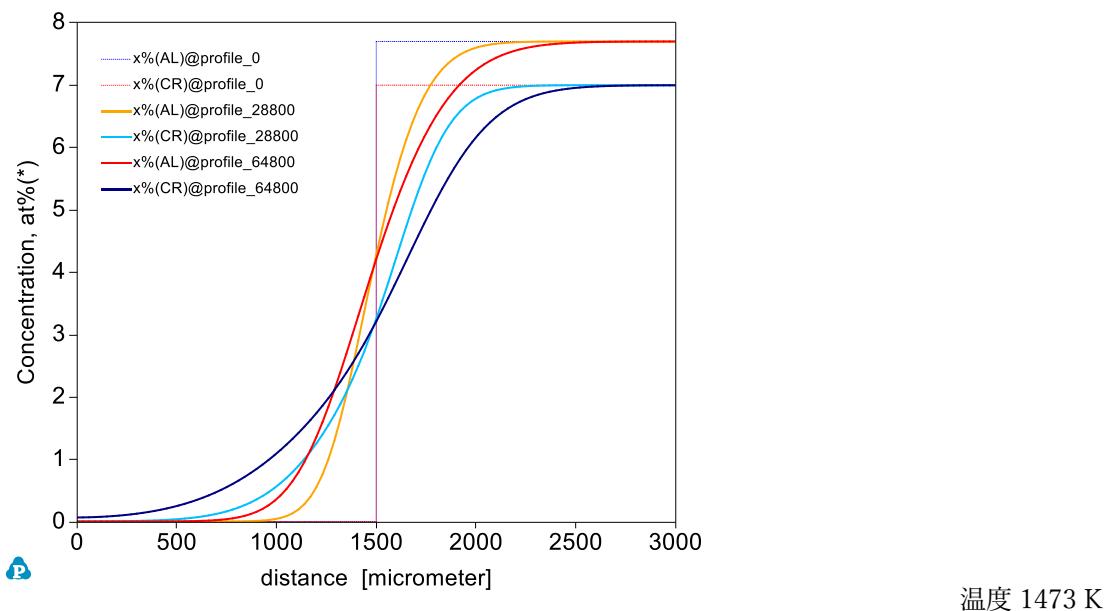


図 3-1 計算による濃度分布図

次に、Ti-5.9Al と Ti-4.8Cr (at.%) の拡散対、温度 1473 K、18 時間=64800 秒後の濃度分布を計算した結果を図 3-2 に示す。試料の長さは左右それぞれ $1500 \mu\text{m}$ とした。
 文献 2011Li の Fig.7 (b) を下に示す。

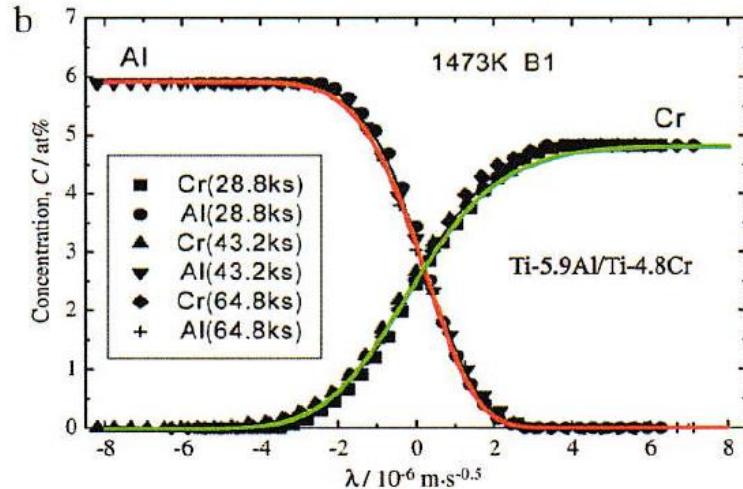


Fig. 7. Simulated concentration profiles for (a) the Ti/Ti-7.7Al-7.0Cr and (b) Ti-5.9Al/Ti-4.8Cr ternary diffusion couples at 1473 K in a comparison with the experimental measurement [10].

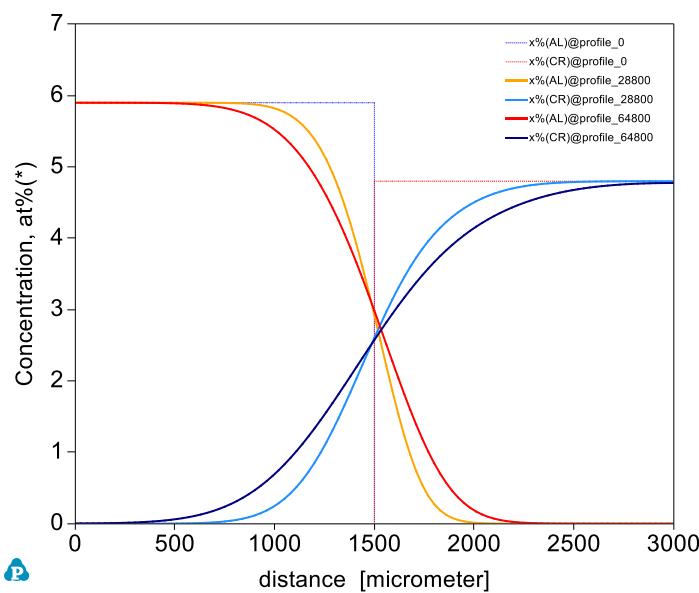


図 3-2 計算による濃度分布図

Ti-5.9Al と Ti-4.8Cr

温度 1473K, 18 時間後

補足説明 :

文献 2011Li の Fig.7 の横軸は、 $\lambda = (10^{-6})m/s^{-0.5}$ です。

$$18 \text{ 時間} = 64800 \text{ sec},$$

$$\sqrt{(64800 \text{ sec})} = 254.56$$

したがって、 $1000 \mu\text{m}$ とは、 $1000 \mu\text{m}/254.56 = 3.93E-06$ 、 $\lambda \doteq 4$ (Fig.7) の位置になる。

平均拡散距離 $z = \sqrt{(2 D t)}$ を求めてみる。

D は拡散係数、t は拡散時間

温度 1473K における拡散係数が $8E-13 (\text{m}^2/\text{s})$

拡散時間が 18 時間 = 64800 sec

の場合、 $z = 0.000322 \text{ m} = 322 \mu\text{m}$ となる。

文献 :

2011Li Assessment of diffusion mobility for the bcc phase of the Ti-Al-Cr system.

W.Li, B.Tang, Y.-W.Cui, R.Hu, H.Chang, J.Li, L.Zhou,

CALPHAD, 35 (2011), 384-390.

2004Tak Journal of Japan Institute of Light Metals.

軽金属、54 (2004), 280-286.

高橋知司、

Ti-Al-Cr β 固溶体中における相互拡散.