



$\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の構造解析データの取得

田中誠，松平恒昭，河合江美，川島直樹，松本潮，小川貴史，北岡諭
一般財団法人 ファインセラミックスセンター

キーワード：環境遮蔽コーティング， $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ，リートベルト解析，結合原子価法

1. 背景と研究目的

次世代航空機エンジンのホットセクション部材として期待される SiC 繊維強化 SiC マトリックス複合材料 (SiC/SiC) は，超軽量で耐熱性に優れるが，高温の酸素や水蒸気を含む燃焼ガスに対する耐食性に劣る．そのため，SiC/SiC を適用するためには，それを保護する環境遮蔽コーティング (EBC) が不可欠である．この EBC に高温熱源からの熱輻射エネルギーを反射する機能を付与することができれば，EBC 内への熱の流入を抑制し SiC/SiC の温度上昇を抑えることが可能となるため，EBC 内を拡散してきた腐食種による SiC/SiC の酸化劣化を飛躍的に抑制できるものと期待される．熱輻射エネルギーは“電磁波”の一つであることから，輻射熱反射機能は屈折率差が大きく，かつ，高温でお互いが反応しない二種類の耐熱性酸化物を数 100 nm の厚さで交互に積層させることで発現しうる． $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (YT) は，高温水蒸気に対する揮散性に優れ，かつ，屈折率がその他の酸化物よりも大きいことから，輻射熱反射 EBC の高屈折率相の一つとして期待されている．しかし，YT には僅かな固溶域が存在するため，YT 中の物質移動が関与する高温の酸素遮蔽性は化学組成の影響を強く受けることが予想される．

そこで，本研究では，YT 粉末の放射光 X 線回折等を用いて取得した結晶構造情報を基に，高温の酸素ポテンシャル勾配 ($d\mu_{\text{O}}$) 下における YT 中の物質移動機構を解析した．

2. 実験内容

噴霧熱分解法により Y/Ti = 1.006 および 1.013 組成の YT 粉末を合成後，1773 K から急冷して得られたサンプルを用いて，放射光 X 線回折を実施した (BL5S2)．リートベルト解析を実施し，結合原子価法 (Bond valence sum, BVS) により酸化物イオンの結晶内の移動経路を解析した．

3. 結果および考察

Fig. 1 に，YT の BVS 解析結果を示す．図中黄色の領域が酸化物イオンの拡散経路であり，格子間酸素の O(8a) サイト付近と，二つの Ti 原子と二つの Y 原子で囲まれた O(48f) サイトが酸化物イオンの拡散経路となっていることがわかる．なお，BVS 解析からは，酸化物イオンの移動経路は Y/Ti = 1.006, 1.013 の両組成共ほとんど同じで有意な違いは認められなかった．以上より，Y/Ti = 1.006 の場合は，酸素分子が YT 膜表面の格子間酸素の O(8a) サイト付近に取り込まれた後，O(8a) サイト付近と O(48f) サイトを介して移動するものと考えられた．また，第一原理計算の結果を踏まえると，Y/Ti = 1.013 の時の過剰の Y は Ti(16c) サイトに存在すると共に，電気的中性条件を満たすために酸素空孔が O(48f) サイトに形成されるものと考えられた．従って，Y/Ti = 1.013 の場合は，酸素分子が YT 膜表面の酸素空孔サイト ($n = 1/4$ であることから濃度は P_{O_2} に依存せずほぼ一定) に優先的に取り込まれた後，Y/Ti = 1.006 のときと同様の経路で YT 結晶中を移動するものと推察される．

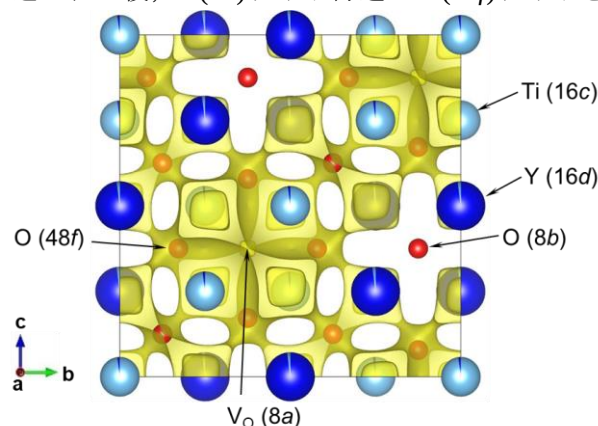


Fig. 1 X 線回折 (結合原子価法, Bond valence sum) により決定した酸化物イオンの拡散経路 (3D visualization program VESTA を用いて作図)

4. 謝辞

本研究は，JSPS 科研費新学術領域研究「機能コア科学」(JP19H05792) の支援を受けて実施されたものである．