

Yb シリケートのラマンスペクトルの理論計算

(ファインセラミックスセンター) ○小川貴史・大谷紀子・横井太史・フィッシャー クレイグ・桑原彰秀・森分博紀・北岡諭

次世代航空機エンジンの高圧タービン部材として、軽量で耐熱性に優れる SiC 繊維強化 SiC マトリックス複合材料 (SiC_f/SiC_m) を使用することにより、エンジン燃費を改善し CO₂ 排出量を大幅に削減することが可能になる。しかし、SiC_f/SiC_m は高温燃焼ガス中の酸素や水蒸気によって減肉・劣化するため、その部材を保護する機能をもつ耐環境性コーティング (EBC: Environmental Barrier Coating) が必要である。高温での耐水蒸気揮散性に優れる Yb シリケート (Yb₂Si₂O₇, Yb₂SiO₅) はどちらも EBC の有望な候補材料である。EBC は SiC_f/SiC_m の上にボンドコートを経由して Yb シリケートを付与した積層構造体である。

同様な積層構造をもつ遮熱コーティング (TBC) において知られているように、熱サイクルに伴う膜中の残留応力は剥離損傷を引き起こす要因の一つである [1]。そのため、EBC 膜中の残留応力分布を把握することができれば、損傷挙動の理解に役立てられる。また、酸素分圧勾配下に暴露される EBC 構成材料中ではイオンの移動が生じ、その結果、Yb シリケートの組成が変化する。ラマン散乱分光を利用して残留応力や組成変化が測定できると期待されるが、Yb シリケートにおけるラマンスペクトルについての先行研究はほとんどなく、応力下での振る舞いはわかっていない。本研究では、主に理論計算を用いて、基準となる Yb シリケート単体のラマン分光スペクトルの特徴を明らかにし、その応力依存性を把握することを目的としている。

結晶構造やラマンスペクトルの計算には、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いた (VASP コード)。ラマンスペクトル強度は Γ 点振動モードの固有ベクトルを用いて、変位に対する誘電定数の変化から計算できる。Fig. 1 に外部応力がない状態におけるラマンスペクトルの計算結果、及び実験結果を示す。Yb₂O₃ についても計算を行い、実験スペクトルと比較した [2]。ピーク周波数について実験に比べ数パーセント程度のずれはあるが、同様な概形をもつスペクトルが得られた。Yb₂Si₂O₇, Yb₂SiO₅ のスペクトルに見られる 800cm⁻¹ 以上の周波数をもつピークは、Yb₂O₃ には存在しない SiO₄ 構造ユニットに関係した振動モードに由来すると考えられる。また、Yb₂Si₂O₇ と Yb₂SiO₅ のスペクトルの比較により、組成判別に使用できるモードが明らかになった。講演では静水圧下におけるピークシフトの検討結果についても述べる。

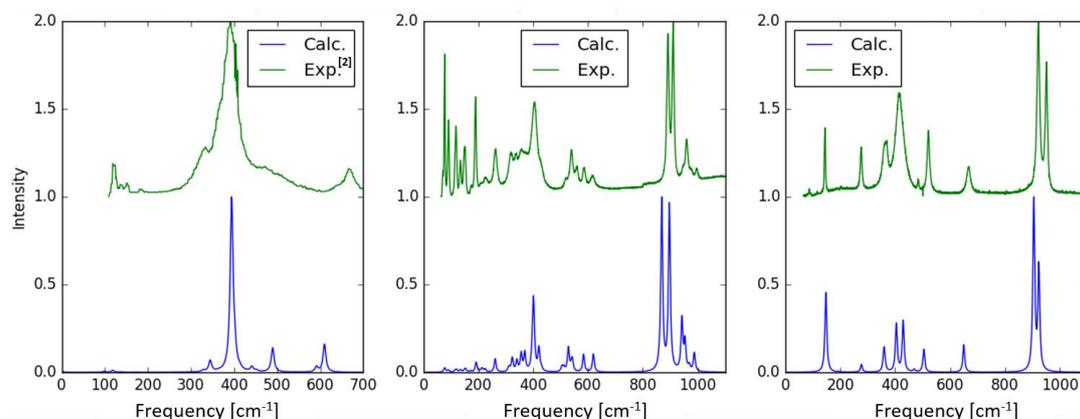


Fig. 1 Measured and calculated Raman spectra of (a) Yb₂O₃, (b) Yb₂Si₂O₇ and (c) Yb₂SiO₅.

【参考文献】 [1] A. G. Evans et al., Prog. Mater. Sci. **46**, 505 (2001).

[2] J. Cui and G. A. Hope, J. Spectroscopy, **2015**, 940172 (2015)