

(219) Fe-Cr-Ni系における固液分配平衡の算出

東京大学大学院
東京大学工学部○山田 朗
梅田 高照, 木村 康夫

1. 緒言

近年、計算状態図の研究が盛んになりつつあり、これまでに数多くの合金系における数学モデル及びそのパラメーターが発表されてきた。しかしながら、2元系合金はともかく多元系合金への拡張において、必要なパラメーターの数が多くなったり、それらの評価法が複雑になるなど困難が伴なうため、多元系計算状態図のほとんどは各2元系パラメーターのみから構成されているのが現状である。これに対し、計算状態図の応用という観点からは、パラメーターの厳密な評価は必ずしも必要でなく、より簡単な方法で状態図上の情報を得る事のできる手法が望まれる。本研究では凝固計算等のシミュレーションに応用するとの目的から、Fe-Cr-Ni系の固液相面をより現実的に再構成できるよう長谷部・西沢等の拡張正則溶体近似による2元系パラメーター⁽¹⁾の検討を行ない、多元系への応用を試みた。

2. 実験方法

長谷部・西沢等のパラメーターにより計算したFe-Cr-Ni系液相面をFig. 1に示す。これを見ると2元系に接する部分は実験状態図とよく合致しているが、オーステナイト相領域で液相線が大きく湾曲しており、Raynor等がまとめた実験状態図に比べオーステナイト相の融点が高く評価されていることがわかる。これはこの液相面が各2元系パラメーターのみによって計算されているためであり、より現実に対応させるためには3元系のパラメーターが必要な事がわかる。そこで、本研究ではパラメーター評価のためのデータとして、Fe-Cr-Ni系における平衡分配係数、融点の測定を行なった。これとRaynorによってまとめられた実験状態図や、活量、比熱等熱力学的データを考慮しながら、最少二乗法により、3元系パラメーターの評価を行なった。

また、これらのデータ（特に固液平衡部）をよく再現しつつ、パラメーターの評価の容易な因子をもとめた。

3. 結果

Fe-Cr-Ni系において、固液平衡部を再現するという目的のために各相の3元系パラメーターの絶対的な値ではなく、固相-液相における2パラメーターの相対的な関係を求めるだけで十分である事がわかった。この事は平衡分配係数が1に近い、任意の合金系の固液平衡部に適用できる事が予想される。

このようにして得られたFe-Cr-Ni系液相面をFig. 2に、Fe-Cr-Ni系固液平衡部におけるタイ-ラインの長さの分布をFig. 3に示した。

文献(1) M. Hasebe and T. Nishizawa: Application of Phase Diagrams in Metallurgy and Ceramics, (1978), PG11 [NBS]

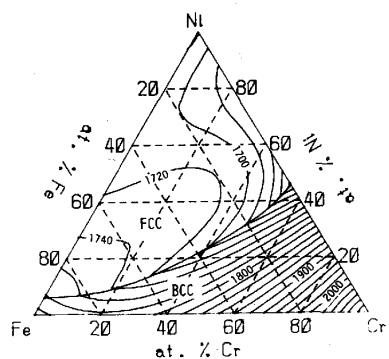


Fig. 1 Liquidus by Hasebe

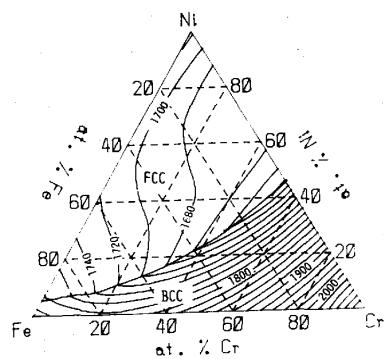


Fig. 2 Liquidus

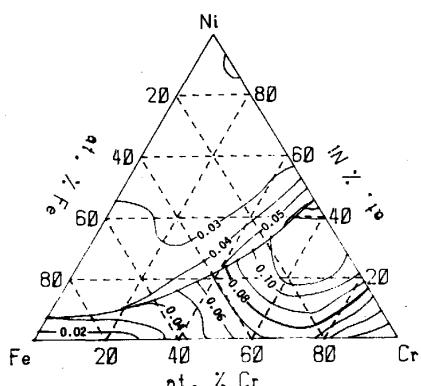


Fig. 3 Length of tie-line