

(529) 2 1/4 Cr-1 Mo 鋼の粒界偏析のシミュレーション

川鉄製鉄(株) 鉄鋼研究所 ○齊藤良行
 ハイテク研究所 今中拓一

1. 緒言: 低合金鋼において不純物元素の粒界偏析に及ぼす合金元素の効果を定量化することは焼もどし脆化機構を考察するうえで重要な課題の一つである。粒界偏析については1) Guttman の提唱した共偏析モデル¹⁾と2) Site competition model の二つの有力なモデルがあり, 実験結果の解釈についても見解が一致しないことも少なくない。本研究では 2 1/4 Cr-1 Mo 鋼の P の粒界偏析に注目し, 上記二つのモデルを用いてコンピュータシミュレーションを行い, Auger 電子分光(AES) 実験結果と比較し, 粒界偏析機構について考察した。

2. コンピュータシミュレーションの概要: 2.1 共偏析モデル: Guttman の共偏析モデル¹⁾を一般化し 3 元系に適用した McMahon²⁾の式を多元系に拡張した。Fe-M₂-...-Mn 系において M_i (i=2, n) の粒界濃度 X_i^{ϕ} はマトリクス中の濃度 M_j (j=2, n) の濃度 X_j^B の関数として以下の式で記述できる。

$$X_i^{\phi} = X_i^B \exp(\Delta G_i / RT) / [1 + \sum_{j=2}^n X_j^B \exp(\Delta G_j / RT)] \quad \dots\dots (1)$$

ここで ΔG_i (i=2, n) は M_i (i=2, n) の偏析エネルギー ΔG_i^0 , i 原子と j 原子の相互作用を示す Wagner の相互作用母係数 ϵ_i^j の関数として以下の式で記述できる。

$$\Delta G_i = \Delta G_i^0 + RT [\epsilon_i^i (X_i^{\phi} - X_i^B) - \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^n \epsilon_i^j (X_j^{\phi} - X_j^B)] \quad \dots (2)$$

2.2 Site Competition Model: Fe-M₂-...-Mn 系において原子間の相互作用を無視したものが本モデルであり, 粒界濃度は(1)式と同一形式で表わされ, $\Delta G_i = \Delta G_i^0$ とおいたものに相当する。

2.3 シミュレーション条件: 0.15C-2.25Cr-1Mo-0.5Mn-Si-P 鋼について上記のモデルを用いて平衡偏析量に及ぼす Si, P の影響を定量化した。ただし共偏析モデルについては Guttman¹⁾が示している Mo-P の強い相互作用を仮定した場合 (Case 1) と溶鉄中の ϵ_i^j を固体にそのまま適用した場合 (Case 2) について計算を行った。さらに P との相互作用が問題となる Si については $\alpha_{ij} = -RT\epsilon_i^j$ を 0 から -100000 kcal/mol まで変化させてシミュレーションを行った。

3. 結果: Fig. 1 は P の粒界偏析に及ぼす Si の効果について, AES 結果とシミュレーション結果を示す。Mo-P の強い相互作用を仮定すると (Case 1), 粒界がほとんど P と Si で占有されるという非現実な結果になる。また site competition モデルによれば P の粒界偏析量は Si 量の増加により, 微減傾向を示し, AES 実験結果と一致しない。Mo-P について非常に弱い相互作用を仮定し, Si-P の強い反発相互作用を仮定することにより, Si による粒界偏析, 焼もどし脆化が説明可能である。

文献 1) M. Guttman: Scripta Metall, 10 (1976) 337

2) C.J. McMahon Jr. and L. Marchant: J. Vac. Sci. Technology.

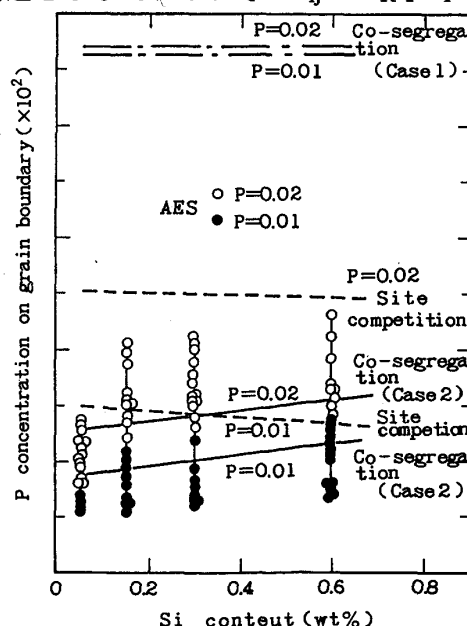


Fig.1 Effect of Si content on grain boundary segregation of phosphorus