

(389) Ni-Cr-W三元系における $\gamma/(\gamma+\alpha_1)$ および $\gamma/(\gamma+\alpha_2)$ 境界の計算  
(Ni-Cr-W三元系の平衡状態に関する研究-II)東京工業大学大学院 ○梶原 正憲  
東京工業大学工学部 菊池 実 田中 良平

1. 緒言 高温ガス炉用耐熱材料として高濃度のCrおよびWを添加したNi基合金の開発が進められており、この合金の使用温度である1000°C付近のNi-Cr-W三元系平衡状態図に関する知見は非常に有用である。著者らは、前報でNi-Cr-W系のNi側固溶体( $\gamma$ 相)中へのW( $\alpha_2$ 相)の溶解度に注目し、タイラインを含めた $\gamma/(\gamma+\alpha_2)$ 相境界線および $(\gamma+\alpha_2+\sigma)$ 三相三角形を実験的に決定した<sup>1)</sup>。一方、 $\gamma/(\gamma+\alpha_2)$ 相境界を相計算法によって求めようとする試みがある。しかし、相計算法は $\sigma$ 相などのTCP相の相境界を推定するための経験的な手法であり、 $\gamma/(\gamma+\alpha_2)$ 相境界を推定するためには不適當なものである。そこで、本報告は熱力学的平衡条件からNi-Cr-W三元系の平衡状態図、特に $\gamma/\alpha_2$ 平衡および $\gamma/\alpha_1$ (Cr側固溶体)平衡を計算によって決定することを試みたものである。

2. 計算方法および結果 Ni-Cr-W三元系の $\gamma$ 相(fcc)および $\alpha$ 相(bcc)それぞれの溶体の自由エネルギー $G$ は(1)式のように表現できる。

$$G = X_{Ni} \cdot G_{Ni} + X_{Cr} \cdot G_{Cr} + X_{W} \cdot G_{W} + RT(X_{Ni} \ln X_{Ni} + X_{Cr} \ln X_{Cr} + X_{W} \ln X_{W}) + {}^E G \quad \text{---(1)}$$

過剰自由エネルギー ${}^E G$ は、Ni-Cr, W-Cr および W-Ni 各二元系における過剰自由エネルギーの和で(2)式のように表現する<sup>2)</sup>。

$$\begin{aligned} {}^E G = & \frac{X_{Ni} X_{Cr}}{X_{Ni} + X_{Cr}} \cdot (X_{Ni} \cdot g_{Ni-Cr} + X_{Cr} \cdot h_{Ni-Cr}) \\ & + \frac{X_{W} X_{Cr}}{X_{W} + X_{Cr}} \cdot (X_{W} \cdot g_{W-Cr} + X_{Cr} \cdot h_{W-Cr}) \\ & + \frac{X_{W} X_{Ni}}{X_{W} + X_{Ni}} \cdot (X_{W} \cdot g_{W-Ni} + X_{Ni} \cdot h_{W-Ni}) \quad \text{---(2)} \end{aligned}$$

$\gamma$ 相および $\alpha$ 相おのおのに対する6個ずつのパラメータ( $\alpha_1, \alpha_2$ のパラメータは同じ)のうち $g_{W-Cr}^{\gamma}$ と $h_{W-Cr}^{\gamma}$ 以外はKaufmanらによって与えられている。そこで、 $g_{W-Cr}^{\gamma} = h_{W-Cr}^{\gamma}$ を実験結果と一致するように選んだ。 $\sigma$ 相が析出しないとして計算した結果が図-1である。これらのパラメータを用いれば任意の温度における $\gamma/\alpha$ 平衡が計算できる。また、Ni-Cr-W-Mo四元系における $\gamma/\alpha$ 平衡も比較的容易に計算できる。

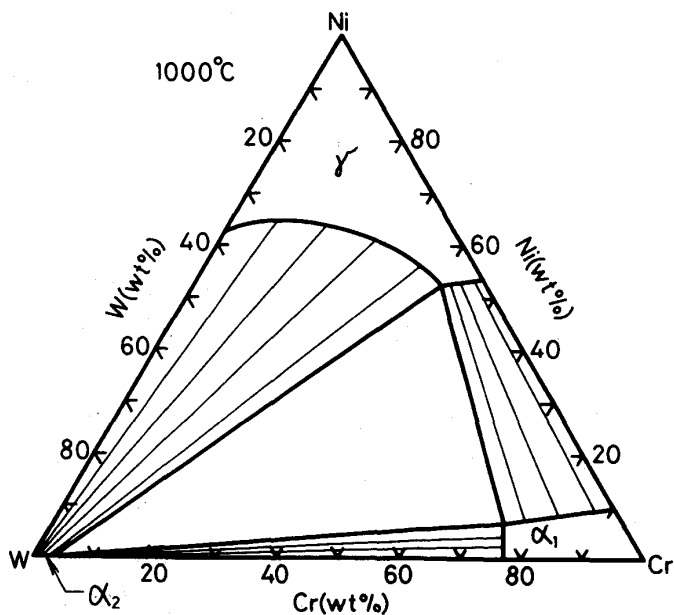


図-1 1000°CにおけるNi-Cr-W三元系状態図の計算結果

1)武田ら:鉄と鋼, 64(1978), S947

菊池ら:鉄と鋼, 64(1978), P1622

2)L.Kaufman and H.Nelson :Z.Metallkunde, 64(1973), P249