

(604)

Ni-Cr-W三元系平衡状態図のコンピュータ計算
(Ni-Cr-W三元系の平衡状態に関する研究-V)

東京工業大学 大学院
東京工業大学 工学部

梶原 正憲
菊池 実 田中 良平

1. 緒言 本報告は、Ni-Cr-W三元系平衡状態図に関する一連の研究^{1~4)}のなかで平衡状態図の計算に関するものである。この問題について前報IIでは、 $\gamma/(\gamma+\alpha_1)$ および $\gamma/(\gamma+\alpha_2)$ 相境界線を計算した²⁾。しかし、そこでは1000~1300℃において安定相として存在する σ 相については全く考慮しなかった。本報告では、この σ 相を考慮した等温断面図の計算を行うとともに、高温においては液相をも取り入れ、900~1700℃の温度範囲における平衡状態図を計算によって決定することを試みた。

2. 計算方法および結果 固溶体相($\gamma, \alpha_1, \alpha_2$)および液相の自由エネルギーは前報IIと類似の準正則溶体モデルで表現した。 σ 相は次のように取り扱った。まず、Ni-CrおよびNi-W各二元系の σ 相の組成を $Ni_{z_*}Cr_{(1-z_*)}$ および $Ni_{z_*}W_{(1-z_*)}$ とした。次にこの両者を直線で結びNi-Cr-W三元系における σ 相の組成はこの直線上の点で表わされるものとした。この場合、bcc相を基準状態に取った σ 相の自由エネルギー G は(1)式のように表現できる⁵⁾。

$$G = X_{Ni} \cdot G_{Ni}^{bcc} + X_{Cr} \cdot G_{Cr}^{bcc} + X_{W} \cdot G_{W}^{bcc} + (1-\alpha) \cdot \Delta G_A + \alpha \cdot \Delta G_B \\ + RT \left[X_{Ni} \ln X_{Ni} - (1-\alpha) z_*^1 \ln z_*^1 - \alpha z_*^2 \ln z_*^2 + X_{Cr} \ln \frac{X_{Cr}}{(1-z_*^1)} + X_{W} \ln \frac{X_{W}}{(1-z_*^2)} \right] \dots (1)$$

ここで、 $\alpha \equiv (X_{Ni} - z_*^1) / (z_*^2 - z_*^1)$, $\Delta G_A = (1-z_*^1) z_*^1 \{ z_*^1 \cdot L_{NiCr} + (1-z_*^1) \cdot L_{Ni} - C_{NiCr} \}$ および $\Delta G_B = (1-z_*^2) \cdot z_*^2 \{ z_*^2 \cdot L_{NiW} + (1-z_*^2) \cdot L_{Ni} - C_{NiW} \}$ である。Kaufmanら⁵⁾は $z_*^1 = 0.38$ としているので、ここではさらに $z_*^2 = z_*^1 = 0.38$ とした。計算結果および実験結果の一例を図1に示す。 σ 相は1350~1000℃で安定に存在し、1350℃では液相と平衡する。900℃では前報IV⁴⁾で示したように σ 相は共析反応によって $\sigma \rightarrow (\gamma + \alpha_1 + \alpha_2)$ に分解してしまう。

- 1) 武田, ほか: 鉄と鋼, 64 (1978), 5947
- 2) 梶原, ほか: 鉄と鋼, 65 (1979), 5903
- 3) 菊池, ほか: 鉄と鋼, 66 (1980), 51321
- 4) 角屋, ほか: 鉄と鋼, 67 (1981), 前ページ
- 5) L.Kaufman and H.Nesor: Z. Metallkde., 64 (1973), p249

図1 1000℃における Ni-Cr-W三元系 等温断面図の比較

- a) 計算結果
- b) 実験結果

