

(498) Fe-C系状態図のコンピュータ解析

東北大学大学院 大谷博司

東北大学工学部 長谷部光弘

西沢泰二

1. 諸言 近年のコンピュータの普及に伴って、多元系状態図の計算による構成が盛んになってきた。本研究はFe-C-M三元系についてのこのような試みの一環として、Fe-C系の状態図を再検討しようとするものである。

2. 計算方法 Fe-C系固溶体の自由エネルギーは、多元系への拡張を考慮して Hillertら¹⁾により提案された Sub-lattice モデルを用いて表現した。このモデルは、固溶体の空間格子を置換位置と侵入位置の2つの副格子に分けて取扱うもので、Fe-C二元系の場合には次のように記述される。

$$G = {}^{\circ}G_{Fe} \cdot x_{Fe} + {}^{\circ}G_{C}^{Fe} \cdot x_C - L_{cv}^{Fe} \cdot x_C \cdot y_C + (\%a) \cdot RT \cdot (1-x_C) \{ y_C \ln y_C + (1-y_C) \ln (1-y_C) \} \quad (1)$$

ここで x_C はCの原子分率、 y_C は侵入位置の副格子上的Cの原子分率で、 $\%a$ をFe 1原子当りの侵入位置の数(液相と α 相では $\%a=1$ 、 α 相では $\%a=3$)とすると $y_C = x_C/\%a(1-x_C)$ である。また ${}^{\circ}G_{Fe}$ は純Feの自由エネルギー、 ${}^{\circ}G_C^{Fe}$ と L_{cv}^{Fe} は竹内ら²⁾の近似式中の ψ_{FeC} と $-\phi_C$ に対応するパラメーターである。このモデルを用いたFe-C系状態図の計算は既にÅgren³⁾によって行なわれているが、ここではさらに α -Feにおける磁気変態の影響も考慮に入れて解析した。すなわち完全常磁性状態を基準にした自由エネルギーの強磁性項 ΔG^{ferro} を(2)式のように表わした。

$$\Delta G^{ferro} = (1-x_C) \cdot \frac{T_C}{T} \cdot \{ \Delta^{\circ} G_{Fe}(T^*) \}^{ferro} \quad (2)$$

ここで $\{ \Delta^{\circ} G_{Fe}(T^*) \}^{ferro}$ は純Feの強磁性項、 T^* はキュリー点を基準にして $T^* = T \cdot ({}^{\circ}T_C/T_C)$ によって変換した温度、 ${}^{\circ}T_C$ は純Feのキュリー温度(1042K)、 T_C は固溶体のキュリー温度を示す。

3. 結果 以上のモデルを用いて、これまで報告されている実験値を熱力学的に解析し、液相および α 相における各パラメーターの値を評価した結果を、Chipman⁴⁾及びÅgren³⁾の値と比較したものがFig.1である。またFig.2は α 相領域の状態図であり、太い実線がFe-Fe₃C系、太い破線がFe-黒鉛系についての計算結果である。

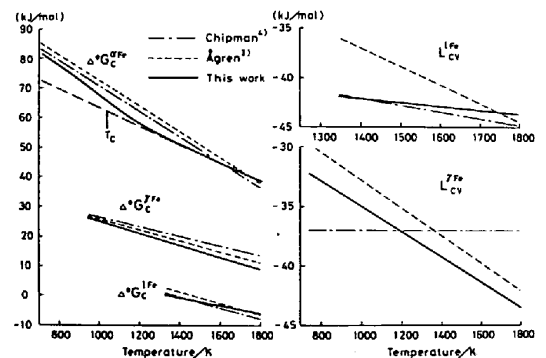


Fig.1 $\Delta^{\circ}G_c$ (graphite standard) and L_{cv}

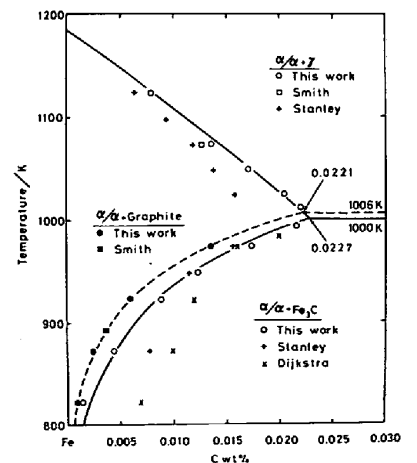


Fig.2 The ferrite field and related areas

文献

- 1) M. Hillert, L.I. Staffansson: Acta Chem. Scand., 24 (1970), 3618.
- 2) 竹内 栄, 可知 祐次: 日本金属学会誌, B-14 (1950), 7.
- 3) J. Ågren: Met. Trans., 10 (1979), 1847.
- 4) J. Chipman: Met. Trans., 3 (1972), 55.