

CALPHAD法による鉄鋼材料の粒界偏析計算

Keywords: 計算状態図, 相変態と組織形成, 粒界偏析, 複合偏析, 鉄鋼MOP

設計・創造分野 計算構造材料設計グループ

大沼 郁雄

OHNUMA.lkuo@nims.go.jp | <http://www.nims.go.jp/research/group/computational-structural/>



研究の背景

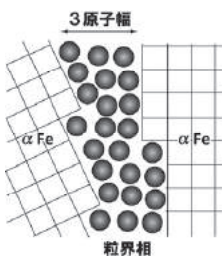
- 鉄鋼材料の相変態と組織形成に及ぼす定量的粒界偏析の重要性
- 3D-APTやμカロリメータEDSによる粒界偏析定量化実験の進展と粒界偏析計算手法開発の要望
- 鉄鋼MOPによるオープンイノベーションの推進

研究の狙い

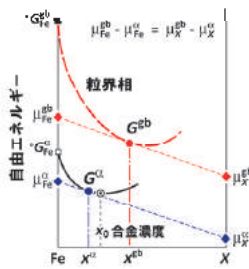
- Hillertの粒界相モデルによる多元系鉄鋼材料における添加元素の粒界偏析計算
- Cr, Cu, Mn, Mo, Nb, Si, Ti, B, C, N, O, P, S等の添加元素(最大5元素)の複合偏析を計算
- 結晶粒径(結晶粒界の体積分率)を考慮した粒界偏析の計算

最先端研究トピックス

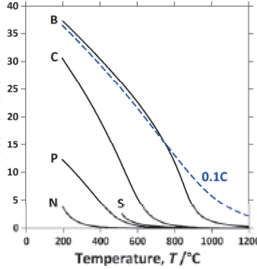
(a) ランダム粒界の3原子層モデル



(b) α-Fe粒内相と粒界相の平衡 (Hillertの平行接線則)



(a) X segregation / 0.001at.%X (α-Fe)
C segregation / 0.1at.%C (α-Fe)



(b) X segregation / 0.001at.%X (γ-Fe)
C segregation / 0.1at.%C (γ-Fe)

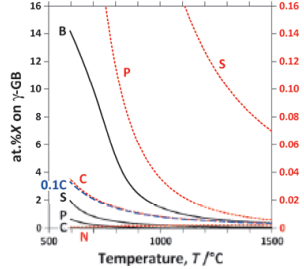
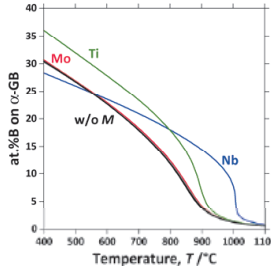


図1 Hillertの粒界相モデルと偏析濃度の計算

図2 αFeとγFeにおけるB, C, N, PおよびSの粒界偏析

(a) B segregation / 0.001at.%B (α-Fe)



(b) B segregation / 0.001at.%B (γ-Fe)

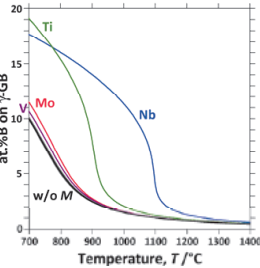
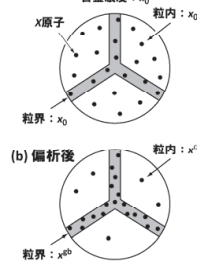


図3 Bの粒界偏析濃度に及ぼす添加元素の影響

(a) 偏析前



(c) Fe-1.39Mn-0.0128B (at.%)
 $f_{GB} = 0.02 - 1\%$ ($D=10 - 0.2\mu\text{m}$)

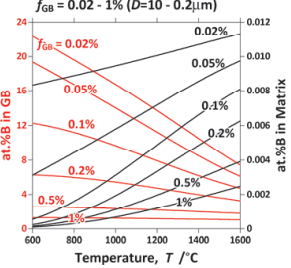


図4 Bの粒界偏析濃度に及ぼす粒界体積分率の影響

まとめ

- CALPHAD法による鉄鋼材料中5元素の複合偏析計算
- 結晶粒径の微細化により粒界偏析濃度が低下する
- NbとTiの複合偏析によりBの偏析濃度が上昇する

実用化への目標

- 鉄鋼MOPによる企業との共同研究
- μカロリメータEDSによる粒界偏析濃度定量化の検証
- 3D-APTによる粒界複合偏析実験と計算結果の検証