



特集記事

ここまで来た計算科学の鉄鋼への応用

コラム 3

CALPHAD法ソフトウェアを実用に役立てるために

To Apply CALPHAD Method Software For Practical Use

田中浩司 Kouji Tanaka

(株)豊田中央研究所 先進金属研究室 主任研究員

マハリ アブラハム Mehari Abraham

愛知製鋼(株) 技術開発部 担当員

1 はじめに

精緻な実験により評価されたデータベースの充実により、固溶体・化合物の自由エネルギーを数値解析することのできるCALPHAD法ソフトは、金属材料分野だけでなく、反応工学や地殻工学研究者などにもユーザーを広げているようである。しかし、実際の鉄鋼材料に関しては、単に状態図計算だけでなく、同ソフトから得られるパラメータを利用した相変態や拡散現象の予測が期待されているおり、一般ユーザーにはそのような計算を実行するのはかなり難しい。

ここでは、実用的な鉄鋼材料の問題に対しThermo-Calc (TC) をいかに活用するかに話題を絞り、どんな配慮をすればどんな計算が可能か、変態点計算の事例で述べてみたい。

2 CALPHAD法の強み

TCをはじめとするCALPHAD法ソフトの強みは言うまでもなく、多元系の解析に圧倒的に適していることである。実用的には10元系以上となる鉄鋼材料には、まさにうってつけであるが、配慮すべきは計算に用いるデータベースである。例えばFe-X-C系にYを添加しようとするとき、Fe-X-CのほかX-Y、Fe-X-Y、Fe-Y-Cなどのパラメータがどの程度そろっているかをチェックし、もし欠けているものがあれば、文献にあたって、自分でパラメータを追加する気構えが必要である。そのため、Hillert-Staffansonの副格子モデルに代表される自由エネルギーモデル¹⁾と、対応するデータベースの記述様式だけは理解しておきたい。

3 Thermo-Calcによる駆動力の計算

連続冷却時の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態開始点(F_s)は、等温変態の潜伏時間から、Scheilの加算反応則によって推定できる。図1では、潜伏時間の計算に必要な核生成の駆動力(DF)をTCから求めている。同ソフトは、最大のDFを持つ α 核の組成を自動的に探し出して値を返す。このとき、本例のようにCr-V添加鋼の連続冷却を考えるのなら、 M_7C_3 やVCなど比較的低温で安定な炭化物は計算対象から外して、実際の過冷却

γ を想定したDFを計算する配慮が必要であろう。パラ平衡下での駆動力を計算するためには、さらに一工夫が必要である²⁾。

近年、マルテンサイト変態点(M_s 点)を理論的に予測する手法が提案されている³⁾。この理論とTCによる自由エネルギー計算(マルテンサイト変態の駆動力の計算)を活用すれば、 M_s 点を計算で導くことができる。図2は、これを各種ステンレス鋼に適用し、実験結果と比較した例である⁴⁾。計算により導かれた M_s 点と実験により求められた M_s 点の対応を表しており、SUS420J2を除き、数10K差の精度で予測できている。SUS420J2に関する不一致は、オーステナイト域での炭化物析出の影響であり、この点を考慮して予測する必要がある。

4 おわりに

この他にも、TCやDictraなど市販のCALPHAD法ソフトを利用する上で、解析対象によって気をつけるべきことがさ

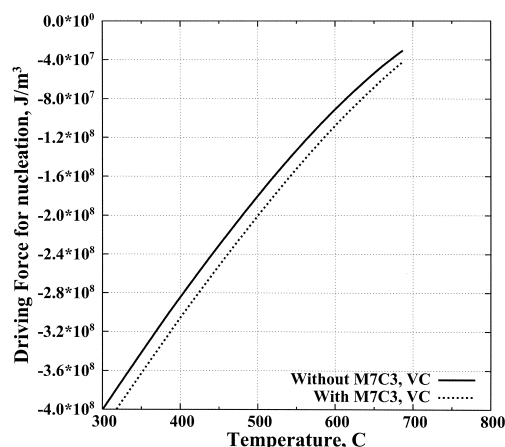


図1 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態駆動力の計算 (2Cr-0.49C鋼)

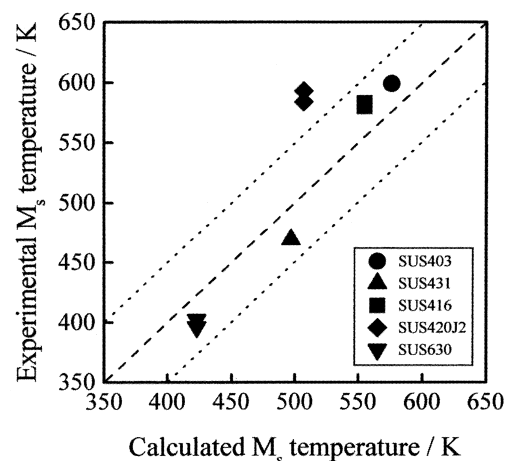


図2 各種ステンレス鋼に関する計算 M_s 点と実験 M_s 点の対応関係

まざま存在する。結局は盲目的にコマンドを打ち込むのではなく、個々の現象とその速度論的な前後関係をよく理解し、その状況を制約条件として計算させることが重要であり、その意味で実験や分析の経験やセンスがものを言うであろう。

参考文献

- 1) M. Hillert and L. Staffanson : Acta. Chem. Scand., 24 (1970), 3618.
- 2) G. Ghosh and G. B. Olson : Metall. Mater. Trans., A, 32A (2001), 41.
- 3) G. Ghosh and G. B. Olson : Acta Metall. Mater., 42 (1994), 3361.
- 4) 中川英樹, 宮崎亨: 鉄と鋼, 85 (1999), 249.

(2004年10月18日受付)