4 副格子モデルを用いた Phase-field 法による Ni-Al-Cr 合金の γ/γ' 組織形成シミュレーション

北嶋 具教¹ Jincheng Wang² 原田 広史¹

¹物質・材料研究機構超耐熱材料センター

²State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, P. R. China

J. Japan Inst. Metals, Vol. 70, No. 8 (2006), pp. 682-685

© 2006 The Japan Institute of Metals

Phase-Field Simulation of Ni-Al-Cr System with Chemical Free Energy Using CALPHAD Method

Tomonori Kitashima¹, Jincheng Wang² and Hiroshi Harada¹

¹High Temperature Materials Center, National Institute for Materials Science, Tsukuba 305-0047

²State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi-An, Shaanxi, P. R. China 710072

The size, morphology and dispersion of γ' precipitates affect the creep behaviors of Ni-base single-crystal superalloys. Phase-field modeling is powerful tool to predict such microstructure evolution. In this research, the Gibbs-free-energy function of γ and γ' phases in the ternary Ni-Al-Cr system with a four-sublattice model was introduced to extend the phase-field simulation of γ/γ' -microstructure-evolution to the ternary system. The values of γ/γ' -phase-compositions were in good agreements with the estimation of Dupin's CALPHAD method.

(Received April 17, 2006; Accepted June 23, 2006)

Keywords: ternary system, four sublattice model, phase-field modeling, nickel-base superalloy

1. 緒 言

ガスタービンの高温動翼部材料として用いられている Ni 基単結晶超合金では、Mo や Re 添加による固溶強化や γ' 相の析出硬化が主な強化機構であり、特に γ' 相の析出形態や分散はタービン翼のクリープ寿命に大きく影響する^{1,2)}。このような合金の組織変化を予測する手段の一つとして、Phase-field 法がある^{3,4)}。

Phase-field 法では、原子易動度や弾性定数、格子定数、界面エネルギーなどの入力パラメータを必要とするが、その中でも、各相の組成を決定するギブス自由エネルギー関数およびそれらの熱力学的パラメータは重要である。このギブス自由エネルギー関数を表現する方法として、CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) 法と組み合わせ、熱力学的データベースのパラメータを用いる方法がある^{5,6)}。Ansara ら⁵⁾は、Ni-Al 系の γ/γ' の相変態に関して 2 副格子および 4 副格子モデルを用いて熱力学的記述を報告している。このモデルは、基本的に点近似を用いた Bragg-Williams モデルと同じであり、短範囲規則度を無視している。しかし、Ansara は多くのパラメータを用いることで、うまく実験値とフィッティングさせた。この他に規則変態の熱力学的記述の方法には短範囲規則度を考慮する Cluster Variation Method⁷⁾ が挙げられるが、ギブス自由エネルギーを得るために非線形方程式を解く必要があり、多元系合金では計算が複雑となる。多元系

合金の熱力学的記述を行うためには市販の Thermo-calc ソフトウェアに用いられる熱力学的データベースのような、単純な Bragg-Williams モデルが有利である。本研究では熱力学的記述に Thermo-calc のデータベースを直接的に用いることができるような Ansara らのモデルを用いた。

これまでに Ni 基合金の γ/γ' の 2 相組織において多元系の組織形成シミュレーションは、L1₂ 構造 (γ' 相) の基点が異なる 4 つのドメイン^{8,9)} の表現が容易でないことなどから、ほとんど報告されていない。そこで本研究では、多元系 Ni 基超合金の Phase-field シミュレーションとして、CALPHAD 法と組み合わせた Ni-Al-Cr の 3 元系ギブス自由エネルギー関数の導出を行った。また、このギブス自由エネルギー関数を用いて Ni-Al-Cr 合金の組織形成について 1 次元数値計算を行った。

2. モデルおよび計算方法

Ni-Al 合金において、不規則相 γ の fcc および規則相 γ' の L1₂ 構造は、Fig. 1 の 1, 2, 3 および 4 で示すような 4 つの単純立方副格子で構成される。このため、本研究では fcc および L1₂ 構造の化学的自由エネルギーの表現に 4 副格子モデルを用いた⁸⁾。Ni-Al 合金の 4 副格子モデルでは、i 番目の副格子の Al の占有率を $y_{\text{Al}}^{(i)}$ と表し、Landau-Lifshitz の法則^{8,9)}により、3 つのオーダーパラメータを 4 つの $y_{\text{Al}}^{(i)}$ および Al の濃度 c_{Al} を用いて次のように定義する。

Fig. 1 Unit cell of the $L1_2$ structure. 1, 2, 3 and 4 are the four equivalent simple cubic sublattices.

$$\eta_1 = \frac{y_{Al}^{(3)} + y_{Al}^{(4)} - y_{Al}^{(1)} - y_{Al}^{(2)}}{4c_{Al}}, \quad \eta_2 = \frac{y_{Al}^{(2)} + y_{Al}^{(4)} - y_{Al}^{(1)} - y_{Al}^{(3)}}{4c_{Al}},$$

$$\eta_3 = \frac{y_{Al}^{(1)} + y_{Al}^{(4)} - y_{Al}^{(1)} - y_{Al}^{(2)}}{4c_{Al}} \quad (1)$$

ここで, $c_{Al} = (y_{Al}^{(1)} + y_{Al}^{(2)} + y_{Al}^{(3)} + y_{Al}^{(4)})/4$ を用いると $y_{Al}^{(1)} = c_{Al}(1 - \eta_1 - \eta_2 + \eta_3)$, $y_{Al}^{(2)} = c_{Al}(1 - \eta_1 + \eta_2 - \eta_3)$, $y_{Al}^{(3)} = c_{Al}(1 + \eta_1 - \eta_2 - \eta_3)$, $y_{Al}^{(4)} = c_{Al}(1 + \eta_1 + \eta_2 + \eta_3)$ である.

また, 多元系 Ni 基超合金の γ' 相において, Ni サイトと Al サイトのサイト占有率は元素によって異なることが報告されており¹⁰⁾, 本研究では 3 元系合金における第 3 元素の占有率を用いて第 3 元素のオーダーパラメータ η' を導入した. ここでは, 熱力学的パラメータが Dupin らによって報告されている Ni-Al-Cr 系¹¹⁾ を考え, 第 3 元素として Cr を用いる. すなわち, 第 3 元素 Cr のオーダーパラメータを次のように定義する.

$$\eta'_1 = \frac{y_{Cr}^{(3)} + y_{Cr}^{(4)} - y_{Cr}^{(1)} - y_{Cr}^{(2)}}{4c_{Cr}}, \quad \eta'_2 = \frac{y_{Cr}^{(2)} + y_{Cr}^{(4)} - y_{Cr}^{(1)} - y_{Cr}^{(3)}}{4c_{Cr}},$$

$$\eta'_3 = \frac{y_{Cr}^{(1)} + y_{Cr}^{(4)} - y_{Cr}^{(1)} - y_{Cr}^{(2)}}{4c_{Cr}} \quad (2)$$

ここで, $c_{Cr} = (y_{Cr}^{(1)} + y_{Cr}^{(2)} + y_{Cr}^{(3)} + y_{Cr}^{(4)})/4$ を用いると, $y_{Cr}^{(1)} = c_{Cr}(1 - \eta'_1 - \eta'_2 + \eta'_3)$, $y_{Cr}^{(2)} = c_{Cr}(1 - \eta'_1 + \eta'_2 - \eta'_3)$, $y_{Cr}^{(3)} = c_{Cr}(1 + \eta'_1 - \eta'_2 - \eta'_3)$, $y_{Cr}^{(4)} = c_{Cr}(1 + \eta'_1 + \eta'_2 + \eta'_3)$ である.

これらの η および η' を用いて, Ni-Al-Cr 系における γ および γ' のギブス自由エネルギーは次のように表すことができる.

$$G = G^{\text{disorder}}(c_{Al}, c_{Cr}) + \Delta G^{\text{order}}(c_{Al}, c_{Cr}, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta'_1, \eta'_2, \eta'_3) \quad (3)$$

ここで, $\Delta G^{\text{order}}(c_{Al}, c_{Cr}, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta'_1, \eta'_2, \eta'_3)$ は規則化エネルギーであり, $G^{\text{order}}(c_{Al}, c_{Cr}, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta'_1, \eta'_2, \eta'_3) - G^{\text{order}}(c_{Al}, c_{Cr}, \eta_i = \eta'_i = 0)$ で与えられる. これを用いて, Ni-Al-Cr 系における不規則相 γ および規則相 γ' ($L1_2$ 構造) のギブス自由エネルギーを表すと次式のようになる.

$$G_m = \sum_i c_i^0 G_i^{\text{fcc}} + \sum_i \sum_j \sum_k \sum_l y_i^{(1)} y_j^{(2)} y_k^{(3)} y_l^{(4)} \Delta G_{ijkl}^{L1_2}$$

$$+ \sum_{s=1}^4 \left(\frac{RT}{4} \sum_i y_i^{(s)} \ln(y_i^{(s)}) \right) + \Delta^{\text{xs}} G_m \quad (4)$$

ここで,

Fig. 2 Contours of the equilibrium order parameters η (a) and η' (b) for Al and Cr in Ni-Al-Cr system.

$$\Delta^{\text{xs}} G_m = \sum_{s=1}^4 y_{Al}^{(s)} y_{Cr}^{(s)} [{}^0 L_{AlCr}^{\text{ord}} + {}^1 L_{AlCr}^{\text{ord}} (y_{Al}^{(s)} - y_{Cr}^{(s)})]$$

$$+ \sum_{s=1}^4 y_{Cr}^{(s)} y_{Ni}^{(s)} [{}^0 L_{CrNi}^{\text{ord}} + {}^1 L_{CrNi}^{\text{ord}} (y_{Cr}^{(s)} - y_{Ni}^{(s)})]$$

$$+ \sum_{s=1}^4 y_{Al}^{(s)} y_{Ni}^{(s)} [{}^0 L_{AlNi}^{\text{ord}} + {}^1 L_{AlNi}^{\text{ord}} (y_{Al}^{(s)} - y_{Ni}^{(s)})]$$

$$+ c_{Al} c_{Cr} \sum_n {}^n L_{AlCr}^{\text{dis}} (c_{Al} - c_{Cr})^n + c_{Cr} c_{Ni} \sum_n {}^n L_{CrNi}^{\text{dis}} (c_{Cr} - c_{Ni})^n$$

$$+ c_{Al} c_{Ni} \sum_n {}^n L_{AlNi}^{\text{dis}} (c_{Al} - c_{Ni})^n + c_{Al} c_{Cr} c_{Ni} L_{Al, Cr, Ni}^{\text{dis}} \quad (5)$$

である. 式中の i, j, k, l は, それぞれの副格子上的 Al, Cr, Ni を示し, ${}^0 G_i^{\text{fcc}}$ は純成分 i の自由エネルギー, $\Delta G_{ijkl}^{L1_2}$ はストイキオメトリック化合物の自由エネルギーである. $\Delta G_{ijkl}^{L1_2}$ は, パラメータ U を用いて以下のように定義する¹¹⁾.

$$\Delta G_{ijkl}^{L1_2} = U_{ij} + U_{ik} + U_{il} + U_{jk} + U_{jl} + U_{kl} \quad (6)$$

ここで, U_{ij} は元素 i と元素 j のボンドエネルギーを考慮した規則性依存のパラメータである. Dupin らは $\Delta G_{AlCrNi}^{L1_2}$ に関しては, 以下のように表現すると報告している.

$$\Delta G_{AlCrNi}^{L1_2} = U_{AlCr} + 2U_{AlNi} + 2U_{CrNi} + 6650 \quad (7)$$

式(3)-(7)のすべてのパラメータは, CALPHAD データベース¹¹⁾ から得ることができる. また, このデータベースでは式(3)における Ni の磁気エネルギーが自由エネルギーに寄与する項について考慮していない.

本研究では, 3 元素の 4 副格子モデル化が目的であり, 計算簡易化のために弾性エネルギーを考慮せず, 系の全自由エネルギーを次のように定義し, この全自由エネルギーを用いて 1 次元の計算を行った.

$$F_{\text{system}}^{\text{ternary}} = \int_V \left(f(c_{Al}, c_{Cr}, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta'_1, \eta'_2, \eta'_3) \right.$$

$$+ \sum_{i=Al, Cr} \alpha (\nabla c_i)^2 + \alpha (\nabla c_2) (\nabla c_3) + \sum_{i=1}^3 \frac{\beta}{2} (\nabla \eta_i)^2$$

$$+ \sum_{i=1}^3 \frac{\beta}{2} (\nabla \eta'_i)^2 \Big) dV \quad (8)$$

ここで, f は自由エネルギー密度であり, α および β は勾配エネルギーの係数である. ギブス自由エネルギー G (J/mol) は, 合金密度 ρ (g/m³) およびモル質量 m (g/mol) を用いて, $f = G\rho/m$ により自由エネルギー密度 f (J/m³) に変換できる.

本計算に用いた非線形 Cahn-Hilliard 拡散方程式および Ginzburg-Landau 方程式を次に示す.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_j \nabla \cdot \left(\hat{M}_{ij} \nabla \frac{\delta F}{\delta c_i} \right), \quad i = Al, Cr, j = Al, Cr \quad (9)$$

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L_{ii} \frac{\delta F}{\delta \eta_i}, i=1\sim 3 \quad (10)$$

$$\frac{\partial \eta'_i}{\partial t} = -L'_{ii} \frac{\delta F}{\delta \eta'_i}, i=1\sim 3 \quad (11)$$

ここで, t は時間, $\tilde{M}_{ij}$ は c_i に関する易動度であり, L_{ii} および L'_{ii} はそれぞれ η と η' に関する易動度である. $\tilde{M}_{ij}$ は, Ni 合金に関する拡散易動度のデータベース¹²⁻¹³⁾で示されているように以下の式(12)および(13)から M_i^{Ni} を得て, 式(14)により求めた.

$$M_i = \frac{1}{RT} \exp \left(\frac{\Delta Q_i^*}{RT} \right) \quad (12)$$

$$\Delta Q_i^* = \sum_j c_j Q_i^j + \sum_p \sum_{j>p} c_p c_j \sum_k A_i^{pj} (c_p - c_j)^k \quad (13)$$

ここで, R は気体定数, T は温度[K], ΔQ_i^* は i 元素の拡散活性化エネルギー[J/mol]である. Q_i^j および A_i^{pj} は温度の線形関数であり計算に用いた値を Table 1 に示す.

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{\text{CrCr}} &= c_{\text{Cr}} [(1 - c_{\text{Cr}})^2 M_{\text{Cr}}^{\text{Ni}} + c_{\text{Cr}} c_{\text{Al}} M_{\text{Al}}^{\text{Ni}} + c_{\text{Cr}} c_{\text{Ni}} M_{\text{Ni}}^{\text{Ni}}] \\ \tilde{M}_{\text{AlCr}} &= \tilde{M}_{\text{CrAl}} = c_{\text{Al}} c_{\text{Cr}} [(1 - c_{\text{Cr}}) M_{\text{Cr}}^{\text{Ni}} - (1 - c_{\text{Al}}) M_{\text{Al}}^{\text{Ni}} + c_{\text{Ni}} M_{\text{Ni}}^{\text{Ni}}] \\ \tilde{M}_{\text{AlAl}} &= c_{\text{Al}} [c_{\text{Cr}} c_{\text{Al}} M_{\text{Cr}}^{\text{Ni}} + (1 - c_{\text{Al}})^2 M_{\text{Al}}^{\text{Ni}} + c_{\text{Al}} c_{\text{Ni}} M_{\text{Ni}}^{\text{Ni}}] \end{aligned} \quad (14)$$

計算では, 無次元化したパラメータを用いた. 無次元化されたギブス自由エネルギーは代表値 Δg を用いて $G^* = G/\Delta g$ で表し, 無次元化時間 $t^* = L_{22} \cdot t \cdot \Delta g$ とした. ここで, 代表値 Δg には 2 元系 Ni-Al 合金の γ 相と γ' 相のギブス自由エネルギー曲線から得られる最大駆動力の 250 J/mol を用いた¹³⁾. また, Poduri らに従って $L_{ii} = L'_{ii} = 16 \tilde{M}_{\text{AlAl}}/a_0^2$ とし^{4,14)}, a_0 は 3.5×10^{-10} m を用いた. グリッドサイズは $\Delta x = 1$ nm, タイムステップは $\Delta t^* = 0.001$, 濃度勾配係数⁶⁾は $\alpha = 2.52 \times 10^{-9}$ J/m, オーダパラメータの勾配係数⁶⁾は $\beta = 7.29 \times 10^{-12}$ J/m とした. 本研究では, α と β は厳密である必要がないために Ni-Al の 2 元系合金のシミュレーションに用いられている値を用いた. 本研究の計算に用いたパラメータを Table 1 に示す.

計算において, Cahn-Hilliard 拡散方程式および Ginzburg-Landau 方程式の数値解法には Semi-implicit-Fourier-Spectral-Method¹⁵⁾を用い, 1 次元の計算領域におけるグリッド数は 256 とした.

3. 結果と考察

Dupin らによって熱力学的パラメータが報告されている 3 元系 Ni-Al-Cr 合金¹¹⁾の 1 次元計算結果について示す. Fig. 2(a), (b)に γ 相と γ' 相のギブス自由エネルギーが最小($\partial G/\partial \eta = \partial G/\partial \eta' = 0$)となるオーダパラメータを Al と Cr の組成についてそれぞれ示す. Fig. 2(a), (b)より, Cr の濃度が小さくなるにつれて, η および η' の値は大きくなり, γ' 相において Al および Cr の原子配列の規則度が大きくなることからわかる. また, Al のオーダパラメータは Cr のそれに比べて大きい値を示した. よって, γ' 相における Cr の原子配列の規則度は Al に比べて小さい.

このギブス自由エネルギー関数を用いて, 温度 1100°C における Ni-18 at%Al-7 at%Cr 合金の 1 次元計算を行った. その結果を Fig. 3 に示す. Al の濃度が高く, Cr の濃度が低い

Table 1 Numerical parameters in the calculation.

1. Calculation parameters	
Temperature, T (K)	1373
Lattice parameter, a_0 (m)	3.5×10^{-10}
Gradient energy coefficient of composition, α (J/m)	2.52×10^{-9}
Gradient energy coefficient of order parameter, β (J/m)	7.29×10^{-12}
Grid number, N	256
Grid size, Δx (m)	1.0×10^{-9}
Time step, t^*	0.001
Dimensional parameter of Gibbs free energy, Δg (J/mol)	250
2. Mobility parameters [eq. (15)]	
$Q_{\text{Al}}^{\text{Al}}$ [J/mol]	-142000 - 72.1T
$Q_{\text{Al}}^{\text{Cr}}$ [J/mol]	-235000 - 82T
$Q_{\text{Al}}^{\text{Ni}}$ [J/mol]	-284000 - 59.8T
$Q_{\text{Cr}}^{\text{Al}}$ [J/mol]	-261700 - 3.71T
$Q_{\text{Cr}}^{\text{Cr}}$ [J/mol]	-235000 - 82T
$Q_{\text{Cr}}^{\text{Ni}}$ [J/mol]	-287000 - 64.4T
$Q_{\text{Ni}}^{\text{Al}}$ [J/mol]	-145900 - 64.3T
$Q_{\text{Ni}}^{\text{Cr}}$ [J/mol]	-235000 - 82T
$Q_{\text{Ni}}^{\text{Ni}}$ [J/mol]	-287000 - 69.8T
${}^0A_{\text{Al}}^{\text{Al,Cr}}$ [J/mol]	335000
${}^0A_{\text{Al}}^{\text{Al,Ni}}$ [J/mol]	-41300 - 91.2T
${}^0A_{\text{Al}}^{\text{Cr,Ni}}$ [J/mol]	-53200
${}^0A_{\text{Cr}}^{\text{Al,Cr}}$ [J/mol]	487000
${}^0A_{\text{Cr}}^{\text{Al,Ni}}$ [J/mol]	-118000
${}^0A_{\text{Cr}}^{\text{Cr,Ni}}$ [J/mol]	-68000
${}^0A_{\text{Ni}}^{\text{Al,Cr}}$ [J/mol]	-211000
${}^0A_{\text{Ni}}^{\text{Al,Ni}}$ [J/mol]	-11300 + 65.5T
${}^0A_{\text{Ni}}^{\text{Cr,Ni}}$ [J/mol]	-81000
3. Thermodynamic parameters	
* fcc-Al phase	
${}^0L_{\text{Al,Cr}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	-45900 + 6T
${}^0L_{\text{Al,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	-162408 + 16.213T
${}^1L_{\text{Al,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	73418 - 34.914T
${}^2L_{\text{Al,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	33471 - 9.837T
${}^3L_{\text{Al,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	-30758 + 10.253T
${}^0L_{\text{Cr,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	8030 - 12.880T
${}^1L_{\text{Cr,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	33080 - 16.036T
${}^0L_{\text{Al,Cr,Ni}}^{\text{dis}}$ [J/mol]	30300
* fcc-L1 ₂ phase	
U_{AlNi} [J/mol]	-14808 + 2.931T
U_{CrNi} [J/mol]	-1980
U_{AlCr} [J/mol]	-830
${}^1L_{\text{Al,Ni}}^{\text{ord}}$ [J/mol]	7204 - 3.743T

γ' 相は核成長し, 粗大化し, 最終的に γ 相および γ' 相内で組成はそれぞれ均一となる. このとき, γ 相および γ' 相の組成はそれぞれ Ni-14 at%Al-9.8 at%Cr, Ni-19.8 at%Al-5.8 at%Cr である. 他の 4 合金(Ni-18 at%Al-2 at%Cr, Ni-18 at%Al-5 at%Cr, Ni-18 at%Al-10 at%Cr, Ni-18 at%Al-12 at%Cr)についても 1 次元の計算を行い, Table 2 に示すような γ 相および γ' 相の組成を得た. これを Dupin らが CALPHAD 法によって求めた結果¹¹⁾と比較し, Fig. 4(a)に示した. 5 つすべての合金における γ と γ' 相の組成は, Dupin らの結果と一致し, それぞれの組成における tie-line の傾きも Fig. 3(b)に示すソフトウェア Thermo-calc によ

Fig. 3 One dimensional microstructure evolution of Ni-18 at%Al-7 at%Cr alloy at 1100°C.

Fig. 4 (a) Ni-Al-Cr ternary phase diagram at 1100°C by Dupin's CALPHAD, and the γ/γ' phase compositions obtained from phase-field simulations of Ni-18 at%Al-2 at%Cr (A), Ni-18 at%Al-5 at%Cr (B), Ni-18 at%Al-7 at%Cr (C), Ni-18 at%Al-10 at%Cr (D), Ni-18 at%Al-12 at%Cr (E), (b) Ni-Al-Cr ternary phase diagram at 1100°C by Thermo-calc software.

Table 2 γ/γ' phase compositions obtained from phase-field simulations of Ni-18 at%Al-2 at%Cr (A), Ni-18 at%Al-5 at%Cr (B), Ni-18 at%Al-7 at%Cr (C), Ni-18 at%Al-10 at%Cr (D), Ni-18 at%Al-12 at%Cr (E).

Alloy	Molar fraction $c_{Al}(-)$		Molar fraction $c_{Cr}(-)$	
	γ' phase	γ phase	γ' phase	γ phase
A 18 at%Al- 2 at%Cr-Ni	0.215	0.160	0.018	0.022
B 18 at%Al- 5 at%Cr-Ni	0.202	0.146	0.042	0.062
C 18 at%Al- 7 at%Cr-Ni	0.198	0.140	0.058	0.098
D 18 at%Al-10 at%Cr-Ni	0.202	0.137	0.076	0.151
E 18 at%Al-12 at%Cr-Ni	0.215	0.138	0.085	0.175

て得られた結果とほぼ同じ傾向を示した。これらより，Cr のオーダパラメータを導入することで得られたギブス自由エネルギー関数は有用であると考えられる。

4. 結 論

CALPHAD 法と組み合わせた Ni-Al-Cr の 3 元系合金のギブス自由エネルギー関数を導出した。その関数を用いて計算を行った結果， γ および γ' 相の組成は Dupin らによって報告された CALPHAD 法による計算状態図と一致し，この関数が有用であることがわかった。

本研究を遂行するにあたり，ご支援いただいた物質・材料研究機構超耐熱材料グループの佐藤彰洋氏，大沢真人氏，横川忠晴氏，Dr. Yeh An-Chou, Mr Philipp Lucas に深く感謝致します。

文 献

- 1) T. Murakumo, Y. Koizumi, T. Kobayashi and H. Harada: *Superalloys 2004*, (Warrendale, PA, USA, Minerals, Metals and Materials Soc., 2004), pp. 155-162.
- 2) T. Kobayashi, H. Harada and J. Zhang: *J. Japan Inst. Metals* **70**(2006) 47-50.
- 3) Y. Wang, D. Banerjee, C. C. Su and A. G. Khachaturyan: *Acta Mater.* **46**(1998) 2983-3001.
- 4) J. Z. Zhu, T. Wang, A. J. Ardell, S. H. Zhou, Z. K. Liu and L. Q. Chen: *Acta Mater.* **52**(2004) 2837-2845.
- 5) I. Ansara, N. Dupin, H. L. Lukas and B. Sundman: *J. Alloys and Comp.* **247**(1997) 20-30.
- 6) J. Z. Zhu, Z. K. Liu, V. Vaithyanathan and L. Q. Chen: *Scripta Mater.* **46**(2002) 401-406.
- 7) R. Kikuchi: *Phys. Rev.* **81**(1951) 988-1003.
- 8) Z. W. Lai: *Physical Review B* **41**(1990) 9239-9256.
- 9) L. D. Landau and E. M. Lifshitz: *Statistical Physics*, (Pergamon, London, 1980).
- 10) H. Harada, A. Ishida, Y. Murakami, H. K. D. H. Bhadeshia and M. Yamazaki: *Applied Surface Science* **67**(1993) 299-304.
- 11) N. Dupin, I. Ansara and B. Sundman: *Calphad* **25**(2001) 279.
- 12) C. E. Campbell, W. J. Boettinger and U. R. Kattner: *Acta Mater.* **50**(2002) 775.
- 13) J. Wang, M. Osawa, T. Yokokawa, H. Harada and M. Enomoto: *Superalloys 2004*, (Warrendale, PA, USA, Minerals, Metals and Materials Soc., 2004) pp. 933.
- 14) R. Poduri and L. Q. Chen: *Acta Mater.* **46**(1998) 3915-3928.
- 15) L. Q. Chen and Jie Shen: *Computer Physics Communications* **108**(1998) 147-158.