

Fe-Al-Zn 3元系ポテンシャル図 (活量図)

平成 23 年 5 月 25 日

株式会社材料設計技術研究所

溶融亜鉛めっき (hot dip galvanizing) において、0.2wt%程度の Al を Zn 浴に添加することをシミュレーションする。Zn 浴の温度は 440~460°Cであるため、計算温度を 450°Cとする。

Al が無ければ Fe-Zn 2元系状態図から、 Γ 、 δ 、 ζ 化合物相が平衡することを予測できる。しかし化合物相が脆いため、これらの化合物相の生成を抑制する方法が必要となる。

0.2wt%程度の Al を Zn 浴に添加すると η (Fe_2Al_5) 相が晶出する。この η (Fe_2Al_5) 相により拡散経路 (diffusion path) が Fe-Al サイドに移ることが期待される。

濃度勾配ではなく、化学ポテンシャルの勾配を駆動力として拡散が起きると考え、活量図を計算してみる。Fe-Al-Zn 3元系 450°Cのポテンシャル図 (活量図) を図 1 に示す。

図 1 中の矢印は活量の動きの予測であり、Fe 側にどれだけの Zn が拡散移動するか依存する。

using Zn-Fe-Al-Si.cdb file

計算指示

Al Log(A) -6 0

Zn Log(A) -1 0

Feed/Activity Conditions	Set SER Elements	Unit /mol	
Phase	Species	Select	Value
Al(FCC_A1)	Al	Log(A)	y
Fe(BCC_A2)	Fe	Feed	b
LIQUID	Zn	Log(A)	x

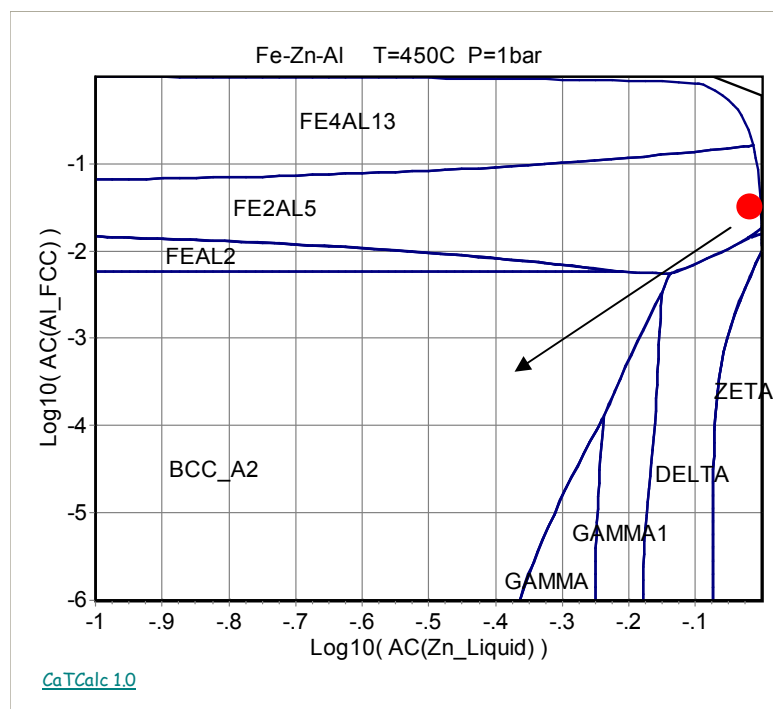


図 1 Fe-Al-Zn 3元系 450°Cのポテンシャル図 (活量図)

横軸は液相の Zn を基準に取った場合の Zn 活量
縦軸は Fcc の Al を基準に取った場合の Al 活量

「Hcp 相の Zn を基準にした Zn 活量」を横軸にした場合を、参考のために図 2 に示す。

活量は基準の取り方により値が少し変わることがわかる。

Fe-Al-Zn 3元系 450°C等温断面図を図 3 と図 4 に示す。

using Zn-Fe-Al-Si.cdb file

計算指示

Set SER

Al Log(A) -6 0

Zn Log(A) -1 0

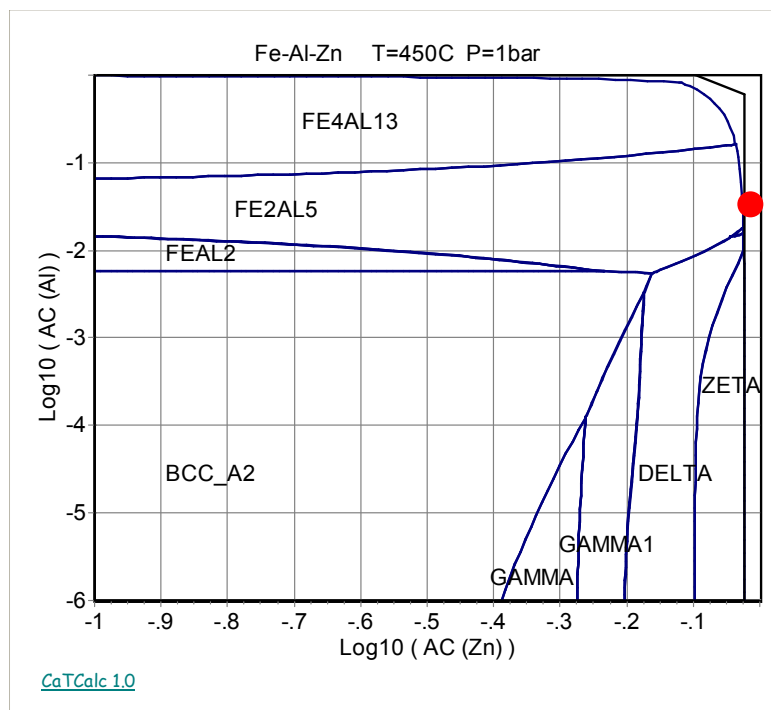


図2 Fe-Al-Zn 3元系 450°Cのポテンシャル図 (活量図)
横軸は Hcp 相の Zn を基準に取った場合の Zn 活量
縦軸は Fcc の Al を基準に取った場合の Al 活量

活量値の確認 (Zn の融点は 420°C)

Zn-0.2wt%Al at 450°C における Al の活量は

$$AC(Al) = \exp((-47739 - (-26063)) / (8.31451 * 723.15)) = 0.027$$

$$\text{Log}_{10}(AC(Al)) = -1.569$$

Zn の活量は、液相を基準にすると

$$AC(Zn) = \exp((-36180 - (-36151)) / (8.31451 * 723.15)) = 0.995$$

$$\text{Log}_{10}(AC(Zn)) = -0.002$$

Zn の活量は、Hcp 相を基準にすると

$$AC(Zn) = \exp((-36180 - (-35828)) / (8.31451 * 723.15)) = 0.943$$

$$\text{Log}_{10}(AC(Zn)) = -0.025$$

文献

05Liu Liquid Metal Corrosion of 316L, Fe3Al, and FeCrSi in Molten Zn-Al baths

X.Liu, et al., Metal. Mater. Transactions A, 36A (2005), 2049-2057.

05Nis 西澤泰二、ミクロ組織の熱力学、日本金属学会 (2005), pp174.

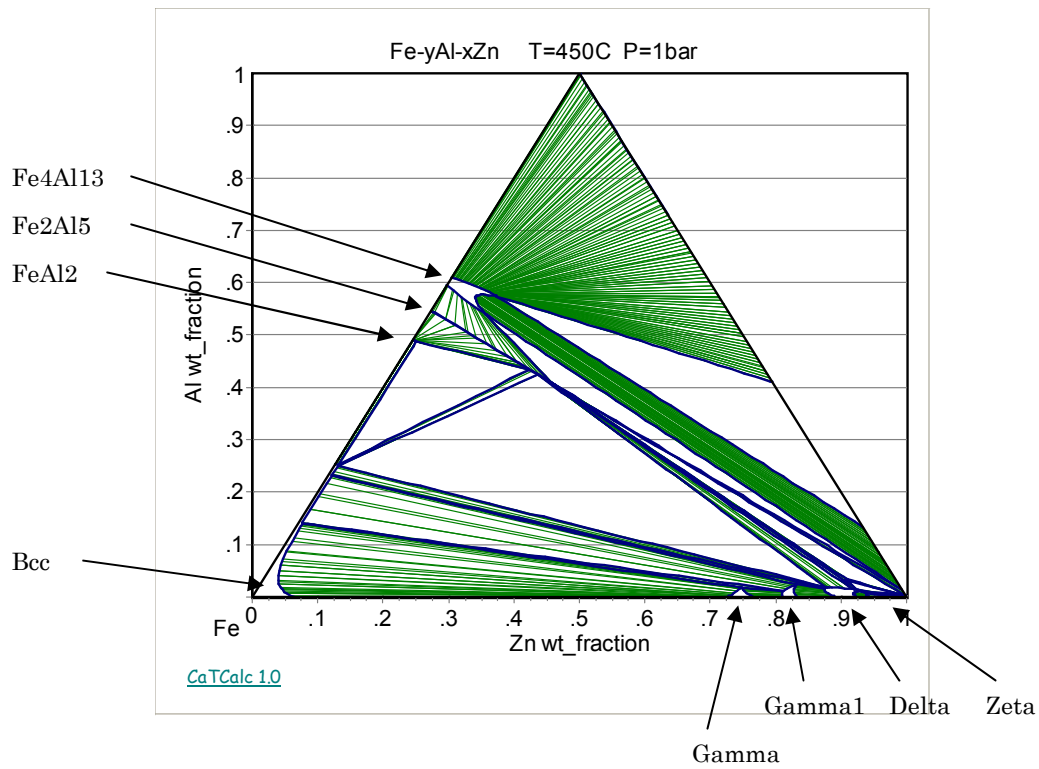


图3 Fe-Al-Zn 3元系 450°C等温断面图

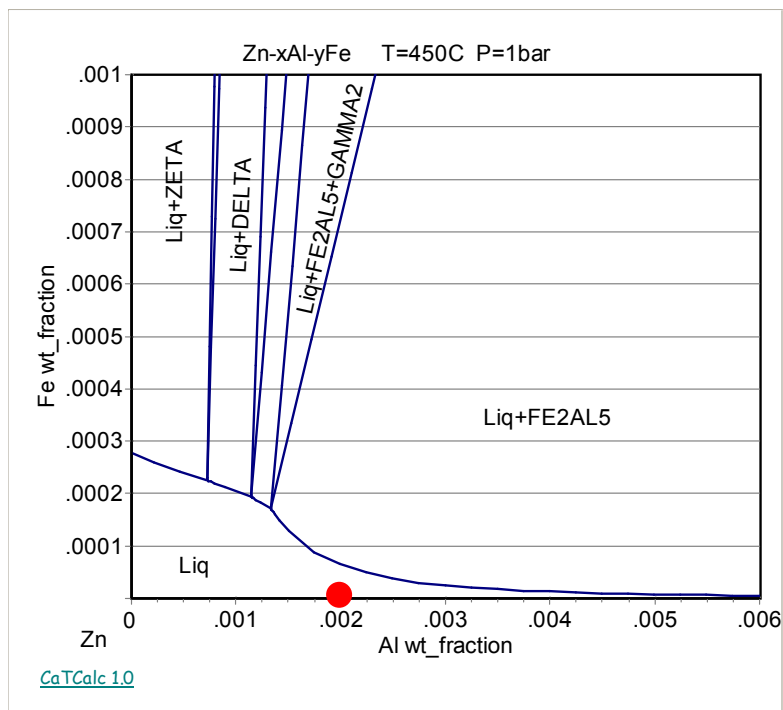


图4 Fe-Al-Zn 3元系 450°C等温断面图 Zn コーナ
赤丸印は Zn-0.2wt%Al 合金 (液相)