

Mu (μ) 相は、Fe-Mo, Fe-Nb, Fe-Ta, Fe-W, Co-Mo, Co-Nb, Co-Ta, Co-W, Ni-Ta などの二元系において安定な相です。

Fe-Mo 2 元系において Mu 相は安定相であり、第 3 元素を添加することにより、どの方向に Mu 相の領域が伸び、どれだけ固溶するのか興味深い。本書は Mu 相の熱力学モデルについてまとめ、Fe 合金系と Ni 合金系における Mu 相のパラメータを紹介する。

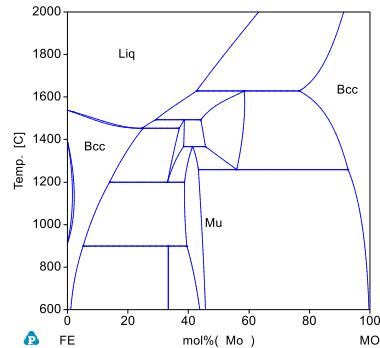
Pearson	Space group	Struktur	Prototype
hR13	R3m	D85	Fe7W6

Fe-Mo 2 元系の Mu 相は 1370°Cまで存在する。

Fe-Nb 2 元系の Mu 相は 1523°Cまで存在する。

Fe-Ta 2 元系の Mu 相は 1776°Cまで存在する。

Fe-W 2 元系の Mu 相は 1637°Cまで存在する。



1 Fe-Mo-Cr

Fe-Mo-Cr 3 元系に関しては文献 1988And を参照のこと。

1000°Cの等温断面図を右に示す。Mu 相 Fe7Mo6 をラインコンパウンドなら (Fe)7(Mo)6 組成幅を持たせるなら、

(Fe)7 (Mo)2 (Fe,Mo)4

3 元系なら、

(Cr,Fe)7 (Mo)2 (Cr,Fe,Mo)4

の熱力学モデルとしている。

Mu 相のエンドメンバーは 6 個あり、

① Cr:Mo:Cr

② Cr:Mo:Fe

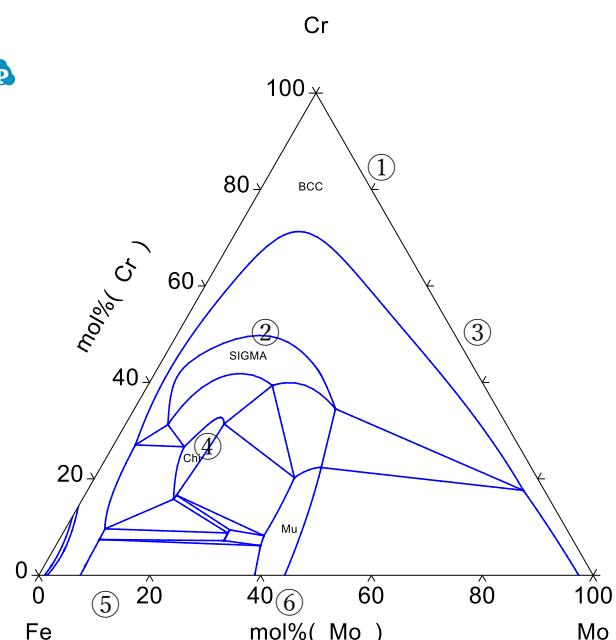
③ Cr:Mo:Mo

④ Fe:Mo:Cr

⑤ Fe:Mo:Fe

⑥ Fe:Mo:Mo

その位置を図上に示す。



配位数より、第1副格子には Fcc、第2副格子には Bcc、第3副格子には Bcc を基準とする自由エネルギーを設定する。

2 Fe-Mo-Ni

Fe-Mo-Ni 3元系に関しては文献 1992Fri を参照のこと。
1200°Cと 1000°Cの等温断面図を右に示す。

Mu 相 Fe₇Mo₆ を3副格子とし

(Fe)7 (Mo)2 (Fe,Mo)4

(Fe,Ni)7 (Mo)2 (Fe,Mo,Ni)4

の熱力学モデルとしている。

エンドメンバーは6個あり、

⑪ Fe:Mo:Fe

⑫ Fe:Mo:Mo

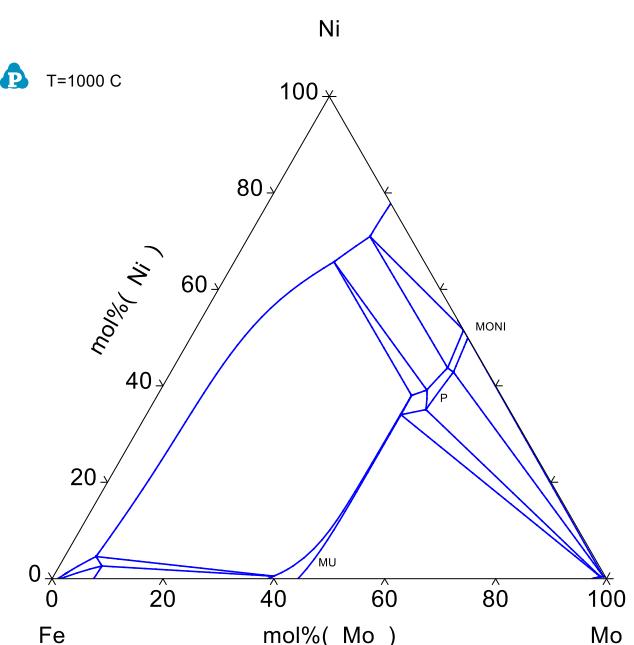
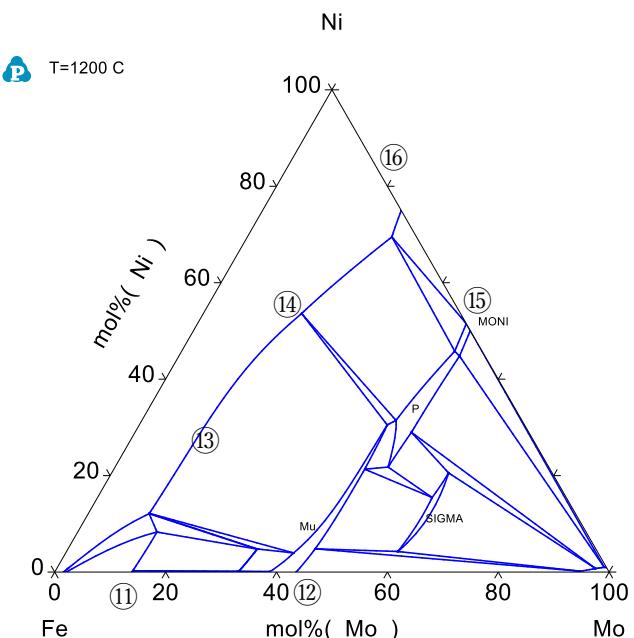
⑬ Fe:Mo:Ni

⑭ Ni:Mo:Fe

⑮ Ni:Mo:Mo

⑯ Ni:MoNi

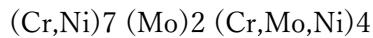
その位置を図上に示す。



3 Cr-Mo-Ni

Mu 相は平衡状態図に現れない。そこで、熱力学パラメータを確認してみる。

Mu 相 3 副格子とし



熱力学モデルとする。

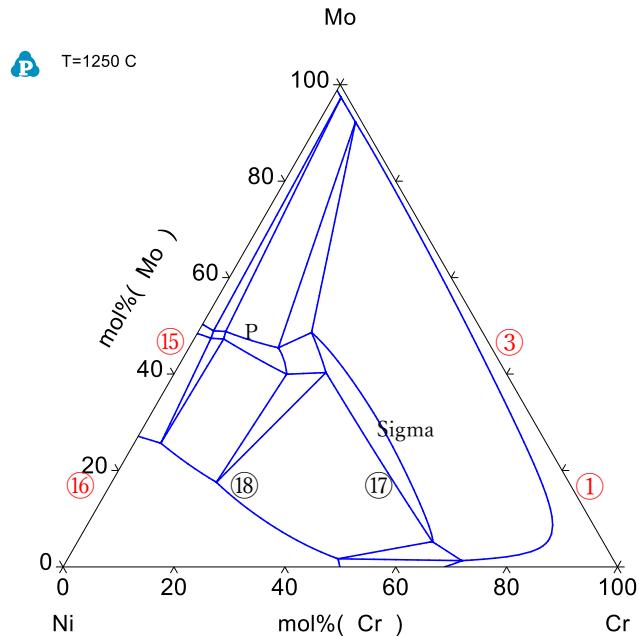
エンドメンバーは 6 個あり、



その位置を図上に示す。

①, ③, ⑮, ⑯ は前述と同じ

パラメータを用いることにする。



エンドメンバー⑦⑧の自由エネルギーを $\Delta G = 0$ とすると、Mu 相は非平衡になる。

```
PARA G(MU,CR:MO:NI;0) +7*GFCCR +2*GHSERMO +4*GCCNI +0;
```

```
PARA G(MU,NI:MO:CR;0) +7*GHSERNI +2*GHSERMO +4*GHSERCR +0;
```

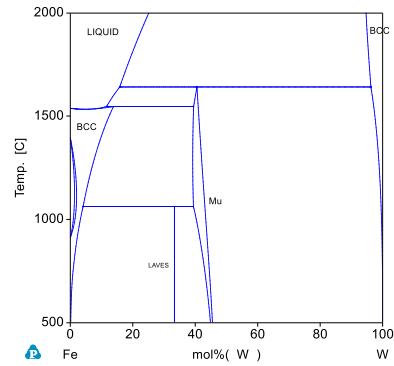
⑦ ⑧ の自由エネルギー ΔG に値を設定することで、もしくは③と⑮の間の相互作用パラメータ $L(MU,CR,NI:MO:MO;0)$ に値を設定することで、Mu 相を最適化できる。

2014Yan(J. Nuc. Mat., 448 (2014), 282-293.) は Mu 相のパラメータを載せている。

4 元素 W

Fe-W 2元系状態図を右に示す。

Mu 相 = Fe₇W₆



Fe-Cr-W 1988Gus2

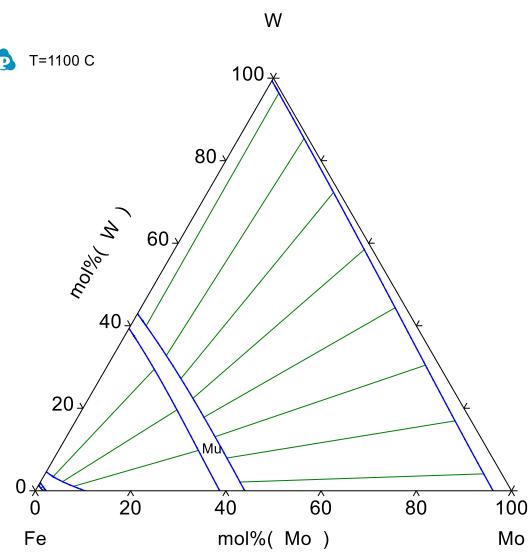
Fe-Ni-W 1986Gui

Fe-Mo-W 1988Gus3

T=1100 C

1100°Cの等温断面図

を右に示す。



5. Ni - Ta

Ni-Ta 2元系の Mu 相 (NiTa) は、1570°Cまで存在する。

副格子	①	②	③	④	⑤
結晶 ワイコフポジション	1(a)	2(c)	2(c)	2(c)	6(h)
Coordination Number CN	12	15	16	14	12

四副格子モデル ① ② ③ ④ ⑤の順に並べ
 $(B)_1(A)_2(A)_2(A)_2(B)_6$

1番目と4番目内で混ざり合う

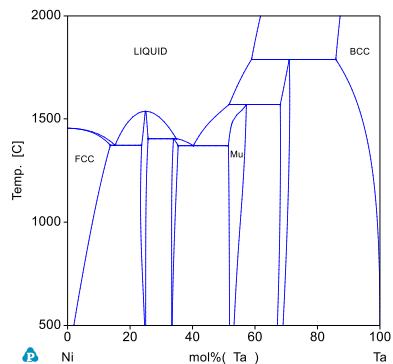
$(A,B)_1(A)_2(A)_2(A,B)_2(B)_6$
 2番目と3番目を統合することで
 $(A,B)_1(A)_4(A,B)_2(B)_6$

三副格子モデル

$(B)_1(A)_2(A)_2(A)_2(B)_6$
 1、2、4、5番目内で混ざり合う
 $(A,B)_1(A,B)_2(A)_2(A,B)_2(A,B)_6$
 1番目と5番目を統合し、
 2番目と4番目を統合
 $(A,B)_7(A)_2(A,B)_4$

二副格子モデル

$(B)_7(A)_6$



Mu 相を $(Ni,Ta)_1(Ta)_4(Ni,Ta)_2(Ni,Ta)_6$

4副格子の熱力学モデルで記述できる。

1994Ans (CALPHAD, 18 (1994), 99-107.) は、

Mu 相をラインコンパウンドとしている。

2009Zho (CALPHAD, 33 (2009), 632-641.) は、

Mu 相を4副格子モデルとしている。

2018Zho (Thermochimica Acta, 666 (2018), 135-147.) は、Mu 相を4副格子モデルとしている。

文献：

- 1979Oht Ni-Cr-W 系および Ni-Cr-W-Mo 系合金の組織と高温強度.
太田定雄, 青田健一, 元田高司, 鉄と鋼, 65 (1979), 309-318.
- 1984Rag Determination of isothermal section of nickel rich portion on Ni-Cr-Mo system.
M.Raghavan, et. al., Metall. Transactions A, 15A (1984), 783-792.
- 1986Gui Experimental and theoretical study of the phase equilibria in the Fe-Ni-W system.
A.F.Guillermet, L.Ostlund, Metall. Transactions A, 17A (1986), 1809-1823.
- 1988And An experimental study and a thermodynamic evaluation of the Fe-Cr-Mo system.
J-O. Andersson, N.Lange, Metall. Transactions A, 19A (1988), 1385-1394.
- 1988Gus A thermodynamic evaluation of the Cr-Ni-W system.
P.Gustafson, CALPHAD, 12 (1988), 277-292.
- 1988Gus2 An experimental study and a thermodynamic evaluation of the Cr-Fe-W system.
P.Gustafson, Metall. Transactions A, 19A (1988), 2531-2546.
- 1988Gus3 An experimental study and a thermodynamic evaluation of the Fe-Mo-W system.
P.Gustafson, Zeitschrift fur Metallkunde, 79 (1988), 388-396.
- 1992Fri An experimental and thermodynamic study of thephase equilibria in the Fe-Mo-Ni system.
K.Frisk. Metall. Transactions A, 23A (1992), 639-649.
- 1997Ans Thermodynamic modelling of solutions and alloys. (Sigma, Mu, Laves, Chi)
I. Ansara, et al., CALPHAD, 21 (1997), 171-218.