

# フェーズフィールド法によるチタンおよびステンレス鋼の 結晶粒成長シミュレーション

## Simulations of Grain Growth in Titanium and Stainless Steels

関 彰\*      澤田正美      森口晃治      白井善久  
Akira SEKI      Masayoshi SAWADA      Koji MORIGUCHI      Yoshihisa SHIRAI

### 抄 録

フェーズフィールド法を用いてチタンおよびステンレス鋼の結晶粒成長のシミュレーションを行った。Fe, 酸素量の異なる JIS 1 種相当の工業用純チタンの  $\alpha$  粒の結晶粒成長シミュレーションでは,  $\beta$  相を考慮したシミュレーションにより,  $\alpha$  粒成長が  $\beta$  粒のピン止め効果によって抑制されることを示した。オーステナイト系ステンレス鋼 SUS301L の  $\gamma$  粒のメゾスコピック結晶粒成長シミュレーションでは微細析出した Nb(C,N) のピン止め効果をピン止めパラメータにより記述し, Nb(C,N) の大きさを推測することができた。いずれのシミュレーションにおいても実験で得た平均結晶粒径を精度よく再現することができた。

### Abstract

Grain growth simulations of titanium and stainless steels have been performed using phase-field method. In the simulation of Ti-rich Ti-Fe-O ternary alloys modeling commercially pure titanium, it was shown that a grain growth is suppressed by the pinning effect by  $\beta$  grains in thermal equilibrium. In the mesoscopic grain growth simulation of SUS301L austenitic stainless steel alloyed with Nb, where the pinning effect of Nb(C, N) is described by one pinning parameter, the average size of Nb(C, N) particles was estimated. The calculated grain sizes obtained by the simulations of the titanium alloy and the stainless steels agree well with experimental grain sizes.

## 1. 緒 言

工業用純チタン・チタン合金(以下, 合わせてチタンと略す)やステンレス鋼において, 鉄鋼材料などの金属材料と同様に, その機械的性能は結晶粒径に大きく影響される<sup>1,3)</sup>。したがって, チタンやステンレス鋼の組織制御<sup>4)</sup>の目的の一つは結晶粒径の制御ということになる。そのためには, 製造条件を最適化する必要がある。

一方, フェーズフィールド法<sup>5,6)</sup>などの組織シミュレーション手法<sup>6)</sup>を用いた組織予測が近年注目されている。われわれも, チタンやステンレス鋼の組織予測に取り組んでおり, 結晶粒成長シミュレーションによる結晶粒径予測もその一つである。

結晶粒成長シミュレーションには, 従来より, モンテカルロ法やセル・オートマトン法によるものが知られている<sup>6)</sup>。どちらも, Gibbs-Thomson 効果を発現するようにアルゴリズムが構築されている。モンテカルロ法は確率論的な手法であるが, セル・オートマトン法も確率論的要素を含んで

いる。これらの方法は簡便であるにもかかわらず, 実際に観察される組織をよく再現する。これらの確率的手法以外に, 最近ではフェーズフィールド法による結晶粒成長シミュレーション<sup>7,9)</sup>も行われている。

フェーズフィールド法あるいはマルチフェーズフィールド法<sup>10)</sup>は, 自由エネルギー計算モデルである CALPHAD 法<sup>11)</sup>と連成させることが容易で, さらに, 物質輸送の記述もその枠組みに含まれている。本報告では, 合金成分や不純物も考慮し, 相安定性などの熱力学計算と物質輸送を正しく取り込んだ結晶粒成長のシミュレーションを行うために, マルチフェーズフィールド法による結晶粒成長のシミュレーションに取り組むこととした。ここではチタンとステンレス鋼について行った結晶粒成長シミュレーションの二例を報告する。いずれも実験を並行して行い, シミュレーションの結果と比較してその精度を検証した。

## 2. マルチフェーズフィールド法

本報告では二次元(2D)マルチフェーズフィールドモデ

\* 鉄鋼研究所 チタン・特殊ステンレス研究部 主幹研究員 工博 兵庫県尼崎市扶桑町 1-8 〒660-0891

ルを用いた。各結晶粒に対してフェーズフィールドが付与される。なお、各結晶粒は相が異なってもよい (図1)。ここで用いた、Eikenら<sup>12)</sup>の定式化によるフェーズフィールド  $\phi_p$  の発展方程式を次式に示す。

$$\frac{\delta\phi_p}{\delta t} = \sum_{q=1}^v \frac{M_{pq}}{v} \left\{ \sum_{r=1}^v \left[ (\sigma_{qr} - \sigma_{pr}) \left( \frac{\pi^2}{\eta^2} \phi_r + \nabla^2 \phi_r \right) \right] + \frac{2\pi}{\eta} \sqrt{\phi_p \phi_q} \Delta g_{pq} \right\} \quad (1)$$

ここで、 $v$ は、バルク、界面領域などに応じて1-3の整数となる。 $M_{pq}$ は $p/q$ 界面の界面移動度、 $\sigma_{pq}$ は $p$ 粒と $q$ 粒の界面エネルギー、 $\Delta g_{pq}$ は $p/q$ 間の変態駆動力である。 $\eta$ は計算上の“界面幅”である。ここでは数値計算メッシュの5倍とした。

発展方程式(1)は、凝固や相変態のような熱力学的駆動力を伴う組織変化だけでなく、粒界の曲率と粒界エネルギーで決まる結晶粒成長も記述する。すなわち(1)式には、次式で表わされるGibbs-Thomson効果<sup>13)</sup>による粒成長の駆動力 $\Delta G$ が含まれている。

$$\Delta G = \frac{2\sigma}{R} \quad (2)$$

ここで $R$ は結晶粒の曲率半径である。

変態駆動力 $\Delta g_{pq}$ は、実材料のデータベースを用いて、例えばThermo-Calc<sup>14)</sup>計算と連成させて計算することができる。すなわち、実用材料の既存のデータベースを使うことができるので、チタンやステンレス鋼などの多成分系実用材料への適用が可能である。

粒界の界面移動度 $M$ については、界面移動の実験値に対するフィッティングパラメータとして扱う場合も多いが、次式のモデルが与えられている<sup>13,15)</sup>。

$$M \approx \frac{V \cdot D_{gb}}{\delta RT} = \frac{V}{\delta RT} D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (3)$$

ここで、 $V$ はモル体積、 $\delta$ は粒界幅、 $D_{gb}$ は粒界拡散係数である。

さらに、マルチフェーズフィールド法では溶質原子の物質輸送方程式(拡散方程式)を連立させることができる。次式は、Tladenら<sup>16)</sup>による、不純物元素の拡散方程式から導かれる物質輸送方程式である。

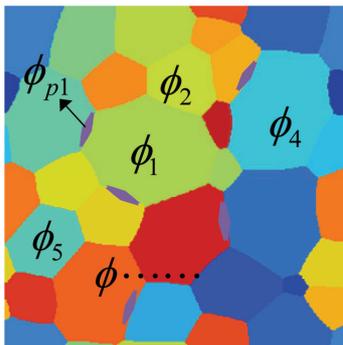


図1 フェーズフィールドを設定した多結晶組織  
Grain structure where phase-field is defined for each grain

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \sum_p \phi_p D_i^p \nabla c_i^p(\mathbf{r}, t), \quad c_i(\mathbf{r}, t) = \sum_p \phi_p c_i^p(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

ここで、 $c_i(\mathbf{r}, t)$ は溶質元素 $i$ の濃度、 $c_i^p(\mathbf{r}, t)$ は $p$ 相内の溶質元素濃度である。 $D_i^p$ は溶質 $i$ の $p$ 相中での拡散係数である。(1)式と(4)式に熱力学計算を連成させて数値計算を行い、組織の発展を計算し二次元で可視化する。

### 3. チタンの結晶粒成長

工業用純チタン薄板の結晶粒成長シミュレーションを行った。工業用純チタン薄板は主に $\alpha$ 相場で製造され、使用される。組織制御の主目的は $\alpha$ 粒径の制御であり、所定の $\alpha$ 粒径は熱処理温度と時間を調整することによって得られる。また、強度を上げる酸素とともに添加されるFeは $\beta$ 安定化元素であり、Fe量の増加により $\alpha + \beta$ 二相領域が広がる。 $\beta$ 相は $\alpha$ 粒の粒成長に影響を及ぼすことが考えられるので、Feと酸素を考慮したシミュレーションを行い、 $\beta$ 相が存在するときの $\alpha$ 粒成長の成長挙動を検討した。シミュレーションは自作のマルチフェーズフィールドソフトウェア<sup>17)</sup>で行った。

#### 3.1 実験

供試材には二種類の工業用純チタンを用いた。その組成を表1に示す。熱間圧延板を $700^\circ\text{C} \times 30\text{min}$ の $\alpha$ 単相域の固溶化熱処理後、60%の冷間加工を施し、 $800^\circ\text{C}$ で600sまでの最終熱処理を行った。この最終熱処理が結晶粒成長過程となる。光学顕微鏡による組織観察の結果、A材は $\alpha$ 単相であった。一方、B材には $\beta$ 相と考えられる第二相が観察された。表1にはThermo-Calcで計算した $800^\circ\text{C}$ での平衡状態における $\beta$ 相の体積%を示している。この値は組織観察と合致している。結晶粒径は光学顕微鏡による組織写真から一定領域での結晶粒数を数え、円の直径換算で算出した。

#### 3.2 シミュレーションの方法

(1)式と(4)式を連立させ、 $\alpha/\beta$ の相変態およびFeと酸素の輸送を考慮したシミュレーションを行った。 $\alpha/\beta$ 相変態の駆動力はTQ-Interface<sup>14)</sup>を用いてThermo-Calcと連携させて計算した。熱力学データベースはTi3を用いた。

モデル材料の成分は実験に用いた供試材の成分(表1)と同じである。計算領域は $400\mu\text{m} \times 400\mu\text{m}$ とした。メッシュ

表1 工業用純チタン供試材の化学組成 (mass%)  
Chemical compositions of samples used for the grain growth experiments of commercially pure titanium

Sample	Fe	O	Ti	Volume % of $\beta$ phase at $800^\circ\text{C}$ (Thermo-Calc)
Material A	0.03	0.05	Balance	0
Material B	0.07	0.07	Balance	1

サイズは  $0.5\mu\text{m}$  でメッシュ数は  $800 \times 800$  である。計算領域の端の効果を除去するために周期境界条件を採用した。Fe と酸素の  $\alpha$  相および  $\beta$  相中の拡散係数は文献値<sup>18)</sup>を用いた。界面エネルギー  $\sigma_{\alpha\alpha}$ ,  $\sigma_{\alpha\beta}$  は  $1\text{J/m}^2$  とした。 $\alpha$  粒の粒界界面移動度  $M_{\alpha\alpha}$  はフィッティングパラメータとしたが異相界面の移動度である  $M_{\alpha\beta}$  は  $M_{\alpha\beta} = M_{\alpha\alpha}/5$  とした。

### 3.3 $\alpha$ 単相域の結晶粒成長

$800^\circ\text{C}$  で  $\alpha$  単相である A 材についてシミュレーションを行い、 $\alpha$  粒界の界面移動度を求めた。平均結晶粒径の時間変化が実験結果と合うように初期組織と  $\alpha$  粒界の界面移動度  $M_{\alpha\alpha}$  を種々変化させてシミュレーションを行った。結果を図2に示す。 $M_{\alpha\alpha} = 6 (\times 10^{-12} \text{m}^4/\text{Js})$  で、実験の結果とシミュレーション結果はよく一致しているため、この値を  $800^\circ\text{C}$  での  $\alpha$  粒界の界面移動度とした。界面移動度としてこの値を用いた時の A 材のシミュレーション組織と対応する組織写真を図3に示す。

### 3.4 $\alpha + \beta$ 二相域の結晶粒成長

B 材は  $800^\circ\text{C}$  では  $\beta$  相が存在し、 $\alpha + \beta$  二相になる。 $\alpha/\beta$  相間の Fe と酸素の分配と  $\alpha/\beta$  の相変態を考慮する必要があるため、拡散計算と相変態駆動力計算との連成計算を行った。 $\alpha$  粒界の界面移動度は A 材に対して求めた値を使った。 $\beta$  粒の量と初期配置は  $\alpha$  結晶粒の成長挙動に大きく影響すると考えられる。 $\beta$  相の体積%は Thermo-Calc 計算の結果を用い、1%とした。 $\beta$  粒の初期粒径と配置は組織写真を参考に決めた。初期の  $\beta$  粒の大きさは  $4\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$  (メッシュ数  $8 \times 8$ ) とし、 $\alpha$  粒界に優先的に配置した。

B 材のシミュレーション組織と組織写真を図4に示す。図3の組織と比較すると、 $\alpha + \beta$  二相域にある B 材の  $\alpha$  結晶粒成長は  $\beta$  相の共存により抑制されていることがわかる。また、図4のシミュレーション組織において黒色で示される  $\beta$  粒が  $\alpha$  粒界上に存在しており、ピン止め粒子として働

いていることを示している。図5には、A, B 材の結晶粒径の時間変化の計算結果を実験値とともに示す。実験値と

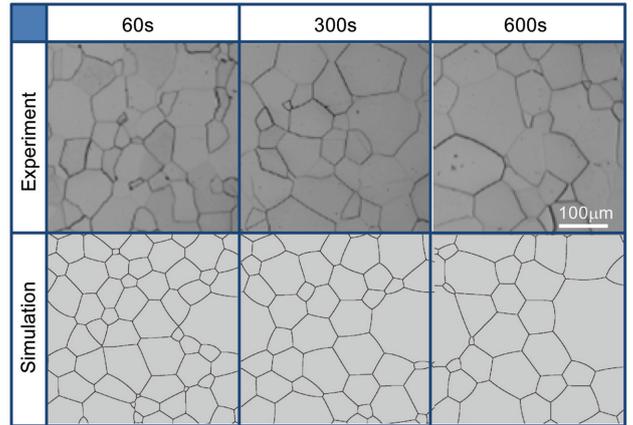


図3 A 材の  $800^\circ\text{C}$  での組織の時間発展 (実験とシミュレーション)

Temporal evolution of the microstructure for Material A at  $800^\circ\text{C}$  (comparison of the experiments and the simulation)

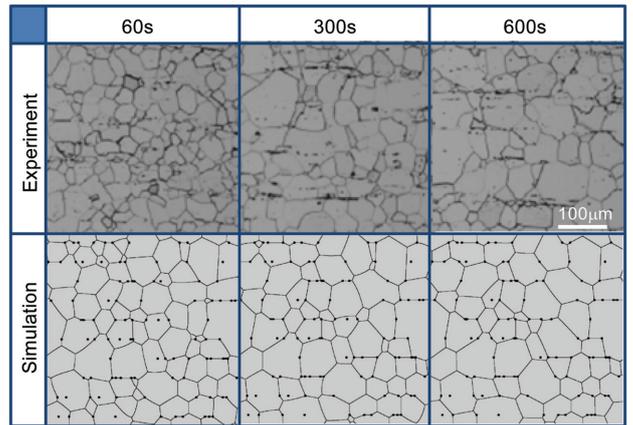


図4 B 材の  $800^\circ\text{C}$  での組織の時間発展 (実験とシミュレーション)

Temporal evolution of the microstructure for Material B at  $800^\circ\text{C}$  (comparison of the experiments and the simulation)

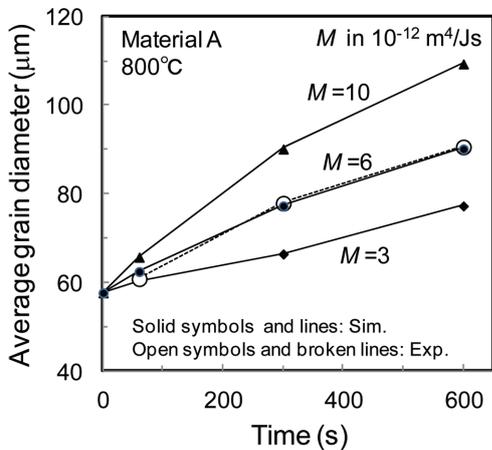


図2 平均粒径に及ぼす界面移動度の影響  
Effect of grain boundary mobility on the average grain diameters

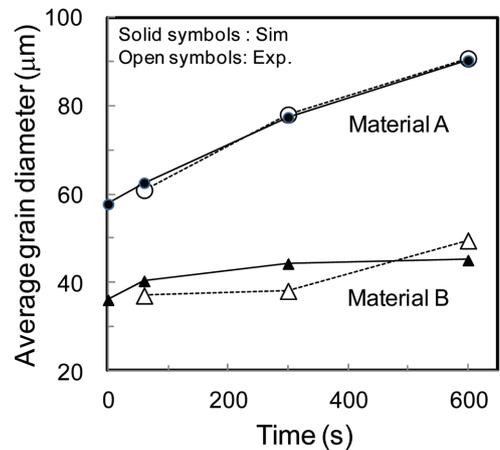


図5 A, B 材の  $800^\circ\text{C}$  における平均粒径の時間変化  
Average grain size evolution for Material A and Material B at  $800^\circ\text{C}$

計算値はほぼ一致している。

#### 4. SUS301LとSUS304のオーステナイト結晶粒成長

Nbを添加したオーステナイト系ステンレス鋼 SUS301L<sup>2,3)</sup>の結晶粒成長シミュレーションを行った。オーステナイト( $\gamma$ )系ステンレス鋼においても結晶粒の微細化は延性を大きく損なうことなく、高強度を得るための有効な方法である。 $\gamma$ 系ステンレス鋼の結晶粒微細化には種々の方法<sup>19)</sup>があるが、本 SUS301L 鋼では数十 nm ほどの大きさの微細な Nb(C,N)を析出させて結晶粒成長を抑制している。析出物の無い SUS304 鋼とあわせて結晶粒成長挙動を調べた。市販のマルチフェーズフィールド法シミュレーションソフトウェアである MICRESS<sup>20)</sup>を用いて、結晶粒界移動における析出物によるピン止め効果の影響を検討した。

##### 4.1 実験

供試材はオーステナイト系ステンレス鋼の二鋼種で、その組成を表2に示す。本 SUS301L には Nb が添加されており、微細な Nb(C,N)が析出する<sup>3)</sup>。一方、SUS304 はこのような微細な析出物がないので、ピン止め粒子がない比較材として用いた。供試材は、17kg 真空溶解した扁平鑄片を熱間圧延した厚さ5mmの熱間圧延板に、熱処理と中間冷間圧延、固溶化熱処理、最終冷間圧延を施して得た0.4mm厚の冷間圧延板である。この冷間圧延板を温度900, 1000, 1100℃、時間30, 120, 480sで最終熱処理した。この熱処理過程がオーステナイト結晶粒の成長過程である。熱処理後の光学顕微鏡による組織写真から結晶粒径を円の直径換算で算出した。析出物の大きさは数十 nm と微細なため、光学顕微鏡では観察できなかった。

##### 4.2 シミュレーションの方法

シミュレーションに用いた MICRESS には、成分を考慮しない単相のメソスケールでの結晶粒成長シミュレーションの機能がある<sup>9,20)</sup>。分散粒子によるピン止め効果を見捨てる場合は、入力する物理パラメータは、界面(粒界)移動度と界面(粒界)エネルギーのみである。組成と温度の影響は全て界面移動度  $M$  の値に反映させている。分散粒子によるピン止め効果を考慮する場合は、次式で定義される実効界面移動度  $M_{eff}$  が用いられる<sup>9)</sup>。

$$M_{eff} = M \exp\left(\frac{-0.12p^*}{|\Delta G| - p^*}\right) \quad \text{for } |\Delta G| > p^*, M_{eff} = M_{min} \ll M \text{ else} \quad (5)$$

ここで、 $p^*$  はピン止め力<sup>13)</sup>である。(5)式は、粒成長の駆動力  $\Delta G$  がピン止め力  $p^*$  によって実質的に減少し、その結果界面移動度が小さくなることを表わしている。MICRESS ではピン止めパラメータとして、次式で定義される量  $\kappa$  を入力する<sup>9)</sup>。

$$\kappa \equiv p^* / \sigma \quad (6)$$

$\kappa$  は長さの逆数の単位を持つ。

計算領域は  $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ 、メッシュサイズは  $0.5\mu\text{m}$  でメッシュ数は  $400 \times 400$  とした。粒界エネルギーは  $1 \text{ J/m}^2$  とした。界面移動度とピン止めパラメータは、フィッティングパラメータとして取り扱い、 $\gamma$  結晶粒の平均サイズが実験結果と一致するように調整した。シミュレーションにおける初期粒径は、実験で得られた30sでの平均 $\gamma$ 粒径に合わせた。両鋼種ともに  $900^\circ\text{C} \times 30\text{s}$  では  $\gamma$  粒径が微細で測定できなかったため、 $900^\circ\text{C}$  では120sの測定粒径を初期粒径とし120sからシミュレーションを行った。

##### 4.3 界面移動度

界面移動度は、 $\gamma$  単相であり析出物によるピン止め効果の無い SUS304 のシミュレーションにより決定した。すなわち、各温度、各時間での実験とシミュレーションで得た平均 $\gamma$ 結晶粒径が一致するように界面移動パラメータを種々変化させたシミュレーションを繰り返した。このようにして各温度で決定した界面移動度  $M$  と温度  $T$  の積  $M \cdot T$  のアレニウスプロットを図6に示す。本プロットの直線性は、(3)式で表わされるモデルが成立していることを示している。この界面移動度を用いて計算した各温度における平均 $\gamma$ 粒径の時間変化を実験値とともに図7に示す。界面移動度パラメータの調整により、計算で得られる粒径と実験値をほぼ一致させられる。

##### 4.4 ピン止めパラメータ

本 SUS301L は微細に析出している Nb(C,N) がピン止め粒子として働く<sup>3)</sup>。(6)式で定義されるピン止めパラメータをフィッティングパラメータとしてシミュレーションを行った。界面移動度は SUS304 の実験結果を使って決定した値をそのまま用いる。ピン止めパラメータは、その値を種々

表2 オーステナイト系ステンレス鋼供試材の化学組成 (mass%)  
Chemical compositions of samples used for the grain growth experiments of austenitic stainless steels

Sample	C	Cr	Ni	Si	Mn	Cu	Mo	N	Nb	Fe	Nb(C,N) precipitation
SUS304	0.05	18.1	8.1	0.5	0.8	0.25	0.25	0.045	0	Balance	-
SUS301L	0.02	17.2	6.6	0.5	1.4	0.25	0.25	0.012	0.05	Balance	Observed

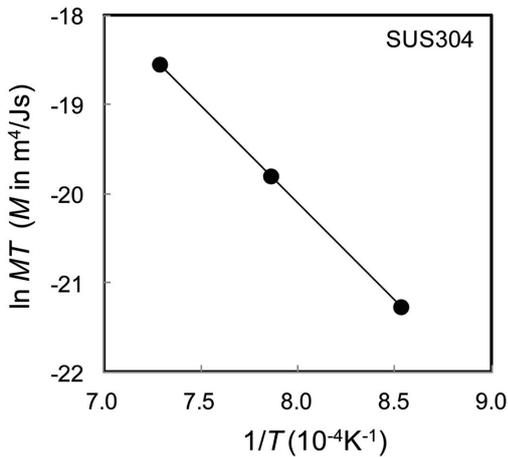


図6 SUS304の界面移動度と温度の関係  
Relation between the grain boundary mobility and temperature for SUS304

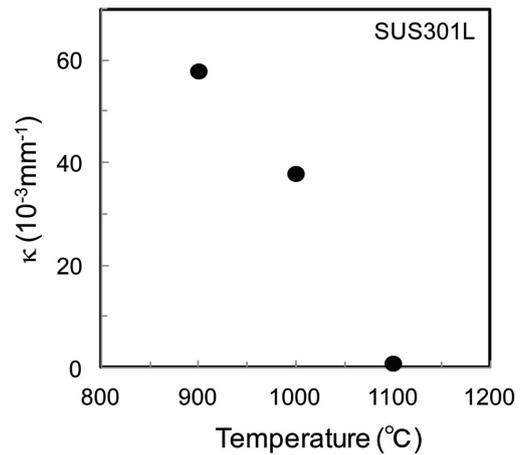


図8 SUS301Lのピン止めパラメータと温度の関係  
Relation between the pinning parameter  $\kappa$  and temperature for SUS301L

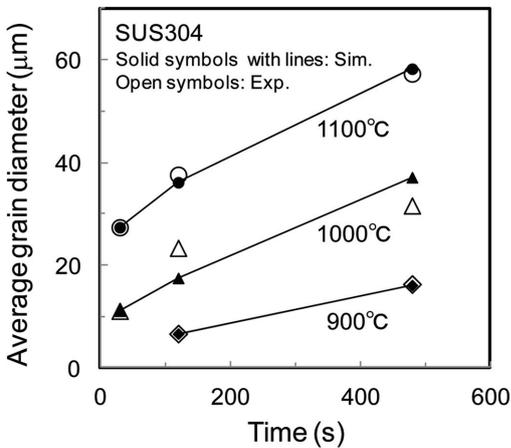


図7 SUS304の平均結晶粒径の時間変化(実験とシミュレーションの比較)  
Average grain size evolution for SUS304 (comparison of the experiments and the simulation)

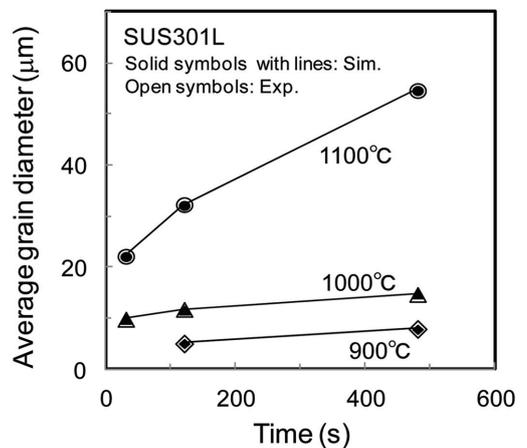


図9 SUS301Lの平均結晶粒径の時間変化(実験とシミュレーションの比較)  
Average grain size evolution for SUS301L (comparison of the experiments and the simulation)

変化させて、 $\gamma$ 粒の平均粒径が実験値と一致するように各温度に対し求めた。図8にこのようにして求めた $\kappa$ の値と温度の関係を示す。 $\kappa$ の値は1100°Cで急激に減少しており、析出物によるピン止めの効果がこの温度以上で大きく低下していることがわかる。これは、微細析出物の析出量や大きさ、分布などが急激に変化していることを示している。これらのピン止めパラメータを使ったシミュレーションで求めた各温度における平均粒径の時間変化を実験値とともに図9に示す。実験値とのフィッティングの精度は非常に良い。図7と比較するとピン止め効果により900°Cと1000°Cで粒径が減少していることがわかる。

#### 4.5 ピン止め粒子の粒径

Nb(C,N)粒子は光学顕微鏡では観察できなかったため、MICRESSのピン止めパラメータを与える(6)式を用いてピン止め粒子の半径を見積もった。(6)式の中のピンニング

力 $p^*$ のモデルはいくつか提案されているが、ここでは以下に示すZener-Smithのピン止めモデル<sup>13)</sup>を用いる。

$$p^* = \frac{3}{2} \cdot \frac{\sigma f}{r_{pin}} \quad (7)$$

ここで、 $f$ は分散粒子の体積分率、 $r_{pin}$ は分散粒子の平均半径である。

(6)式と(7)式から

$$r_{pin} = \frac{3}{2} \cdot \frac{f}{\kappa} \quad (8)$$

が得られる。すなわち、分散粒子の半径を $\kappa$ と $f$ から見積もることができる。 $f$ はThermo-Calc計算で求めた値を使った。 $f$ の値は、900, 1000, 1100°Cに対し、それぞれ、 $7.98 \cdot 10^{-4}$ ,  $6.71 \cdot 10^{-4}$ ,  $4.30 \cdot 10^{-4}$ であった。これらの値を代入して求めた $r_{pin}$ と温度との関係を図10に示す。図から1100°Cで急激なNb(C,N)粒子の粗大化が起きていることが分かる。本図には、透過電子顕微鏡観察で得た

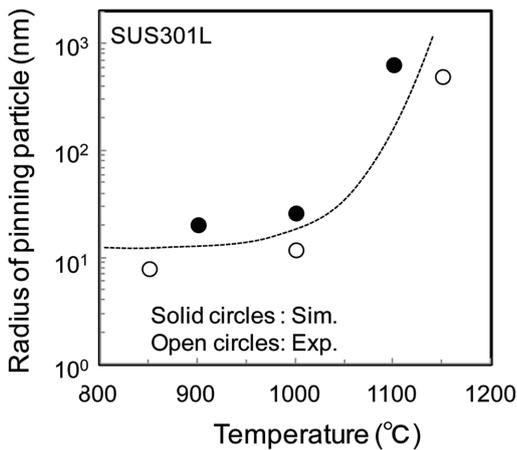


図 10 ピン止めパラメータから計算した SUS301L のピン止め粒子の半径の温度依存性  
Relation between the radius of pinning particles and temperature calculated from  $\kappa$  for SUS301L

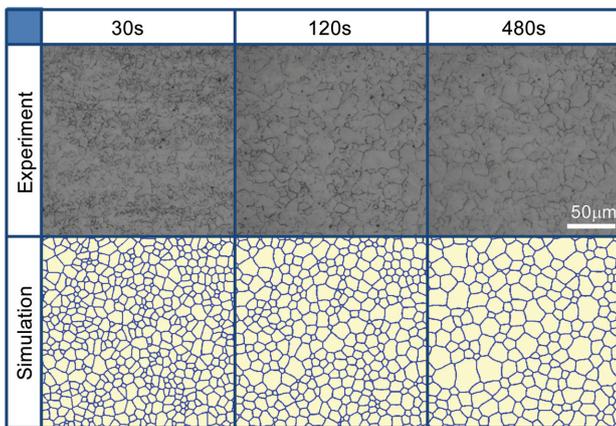


図 11 SUS301L の 1000 °C での組織の時間発展 (実験とシミュレーション)  
Temporal evolution of the microstructure for SUS301L at 1000 °C (comparison of the experiments and the simulation)

Nb (C,N) の半径も示している<sup>3)</sup>。この計算値はこれらの観察値と矛盾しない。図 11 にシミュレーション組織と組織写真の比較を示す。両者は良く似た組織を示している。

## 5. 結 言

結晶粒径の予測技術の確立を目的に、フェーズフィールド法を用いてチタンおよびステンレス鋼の結晶粒成長のシミュレーションを行った。

工業用純チタン薄板の  $\alpha$  粒の結晶粒成長シミュレーションでは  $\beta$  相を考慮したシミュレーションにより、 $\beta$  粒による  $\alpha$  粒成長の抑制効果に関する実験結果を定性的に説明することができた。

微細な Nb (C,N) が析出しているオーステナイト系ステンレス鋼 SUS301L の  $\gamma$  粒の結晶粒成長シミュレーションでは

微細析出した Nb (C,N) によるピン止め効果をピン止めパラメータにより整理し、シミュレーション結果から Nb (C,N) の大きさを推測することができた。

いずれのシミュレーションにおいても実験で得た平均結晶粒径をパラメータフィッティングによりシミュレーションで精度よく再現することができた。フィッティングにより得た界面移動度とピン止めパラメータの値は物理的意味を持ち、一度決めておけば、材料などが同じシミュレーションに適用できる。

## 謝 辞

シミュレーションを実施していただいた夏季実習生 (2012 年 8 月) の東京工業大学学生 Jin Jonghoon 君に感謝する。

## 参照文献

- 1) 安達, 中山, 渋谷, 福村, 藤澤, 栗田: シリンダヘッドガスケット用ステンレス鋼薄板の開発. 新日鉄住金技報. (396), 92 (2013)
- 2) 澤田, 喜多, 渋谷, 藤澤: 精密加工用オーステナイト系ステンレス鋼板の開発. 新日鉄住金技報. (396), 85 (2013)
- 3) Sawada, M., Adachi, K., Maeda, T.: ISIJ Int. 51, 991 (2011)
- 4) 日本鉄鋼協会: 第 161・162 回西山記念技術講座 “鉄鋼とチタンの組織制御技術”. 東京, 日本鉄鋼協会, 1996
- 5) 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法. 東京, 養賢堂, 2012
- 6) Raabe, D.: Computational Materials Science. Weinheim, Wiley-VCH, 1998
- 7) Moelans, N., Blanpain, B., Wollants, P.: Acta Mater. 54, 1175 (2006)
- 8) 諏訪: Phase-field 法による粒成長シミュレーション. 新日鉄技報. (392), 19 (2012)
- 9) Apel, M., Böttger, B., Rudnizki, J., Schaffnit, P., Steinbach, I.: ISIJ Int. 49, 1024 (2009)
- 10) Steinbach, I., Pezzolla, F., Nestler, B., Seesselberg, M., Prieler, R., Schmitz, G. J., Rezende, J. L. L.: Physica D. 94, 135 (1996)
- 11) Saunders, N., Miodownik, A. P.: CALPHAD: A Comprehensive Guide. Elsevier, Oxford, 1998
- 12) Eiken, J., Böttger, B., Steinbach, I.: Phys. Rev. E. 73, 066122 (2006)
- 13) 西澤泰二: ミクロ組織の熱力学. 日本金属学会, 仙台, 2005
- 14) Thermo-Calc Software: <http://www.thermocalc.com>
- 15) Hillert, M.: Metall. Trans. A. 6A, 5 (1975)
- 16) Tieden, J., Nestler, B., Diepers, H. J., Steinbach, I.: Physica D. 115, 73 (1998)
- 17) 関, 森口, 白井, 前田: CAMP-ISIJ. 24, 421 (2011)
- 18) 鉄鋼協会 耐熱強靱チタン研究部会 物性 WG: チタンおよびチタン合金中の拡散データ. 1994
- 19) 高木節雄: ふえらむ. 16, 550 (2011)
- 20) MICRESS: <http://www.micress.de>



関 彰 Akira SEKI  
鉄鋼研究所 チタン・特殊ステンレス研究部  
主幹研究員 工博  
兵庫県尼崎市扶桑町1-8 〒660-0891



森口晃治 Koji MORIGUCHI  
鉄鋼研究所 鋼管研究部  
主幹研究員 工博



澤田正美 Masayoshi SAWADA  
鉄鋼研究所 チタン・特殊ステンレス研究部  
主任研究員



白井善久 Yoshihisa SHIRAI  
鉄鋼研究所 チタン・特殊ステンレス研究部  
主幹研究員