

パーライト組織形成過程の Multi-Phase-Field シミュレーション

Multi-Phase-Field Simulation of Pearlite Microstructure Formation

○学 山本 隆史 (神戸大院) 正 山中 晃徳 (神戸大院)
 正 高木 知弘 (京工織大院) 正 富田 佳宏 (神戸大院)

Takashi YAMAMOTO*, Akinori YAMANAKA**, Tomohiro TAKAKI*** and Yoshihiro TOMITA*
 *Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501
 **Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Kobe, 657-8501
 ***Graduate School of Science and Technology, Kyoto Institute of Technology, Kyoto, 606-8585

Key Words: Phase-Field method, Numerical simulation, Pearlite, Microstructure

パーライト組織を含む鉄鋼材料の力学特性は内部組織の形態や分布により特徴づけられるため、組織形態の予測が重要となる。そこで、相変態による組織形成過程を組織の全自由エネルギーの最小化原理に基づき解析可能な Multi-Phase-Field 法を用いて、パーライト組織形成過程の数値シミュレーションを実施する。本研究では、フェライト相とセメンタイトからなる初期ラメラ組織の形態がパーライト組織形成過程や組織形態に及ぼす影響を検討し、パーライト組織の形成メカニズムを明らかにする。

1. 緒言

パーライト組織はフェライト(α)相とセメンタイト(θ)の微細な層状組織であり力学特性が優れているため、多くの鉄鋼材料で用いられている。パーライト組織を含む鉄鋼材料の力学特性はコロニーやブロックと呼ばれる内部組織の形態や分布により特徴づけられるため、組織形態の予測が重要となる。しかしながら、複雑な内部組織の形成を実験的手法のみで予測し、適切な組織制御方法を決定することは難しい。本研究では、ブロック、コロニーなどのパーライト組織特有の内部組織の形成予測を行うことを最終的な目的とし、相変態による組織形成過程を、組織の全自由エネルギーの最小化原理に基づき解析可能な Multi-Phase-Field 法^(1,2)を用いて、パーライト組織形成過程の数値シミュレーションを実施する。本稿では、初期ラメラ組織におけるラメラ間隔の不均一性が、ラメラの成長過程ならびに組織形態に及ぼす影響を検討する。

2. Multi-Phase-Field モデル

N 個の結晶粒を含む系を考え、 i ($i=1, \dots, N$) 番目の結晶粒を粒 i と定義する。秩序変数として、粒 i の存在確率を表す phase field ϕ_i と炭素濃度 C を定義する。 ϕ_i は粒 i 内では 1、他の粒内で 0 の値をとる変数である。また、 ϕ_i が 0 から 1 に滑らかに変化する領域を界面と定義する。さらに phase field ϕ_i は独立な変数ではなく、任意の点で次式を満たす。

$$\sum_{i=1}^N \phi_i = 1 \quad (1)$$

また、炭素濃度 C は各結晶粒における炭素濃度 C_i の phase field ϕ_i による重み付け和として、次式のように定義される。

$$C = \sum_{i=1}^N \phi_i C_i = \phi_1 C_1 + \phi_2 C_2 + \phi_3 C_3 + \dots + \phi_N C_N \quad (2)$$

系の全自由エネルギーは、次式に示す Ginzburg-Landau 型の Gibbs の自由エネルギー汎関数を用いて定義する⁽¹⁾

$$G = \int_V \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + W_{ij} \phi_i \phi_j \right) + g_c \right] dV \quad (3)$$

全自由エネルギーが時間とともに単調減少し、組織形成が進行すると仮定すると、phase field ϕ_i の時間発展方程式は、以下の TDGL 方程式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (4)$$

ここで、 ΔE_{ij} は、相変態に伴う自由エネルギーの変化量を表しており、例えば粒 i 、粒 j がそれぞれ γ 相、 α 相の場合であれば、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の自由エネルギー変化量を表す項である。本研究では、 ΔE_{ij} は変態エントロピーと過冷度の積として定義し、次式で表す。

$$\Delta E_{ij}(C, T) = \Delta S_{ij} \cdot \Delta T_{ij}(C, T) \quad (5)$$

ここで、変態エントロピー ΔS_{ij} は相により値が決まる。過冷度 ΔT_{ij} は炭素濃度 C と系の温度 T の関数であり、線形化平衡状態図を用いて算出される⁽³⁾。

パーライト変態においては、炭素原子の拡散による炭素濃度の変化が組織形成に大きな影響を与えるため、炭素拡散方程式を解く必要がある。本研究では、炭素原子の拡散流束 J が各粒からの拡散流束 J_i の和で表現されると仮定し、炭素拡散方程式を次式のように表す。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot J = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i J_i \right) \quad (6)$$

各粒内における拡散係数を D_i とすると、拡散流束 J_i は $J_i = D_i \nabla C_i$ と表すことができるため、式(6)は次式のように表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i D_i \nabla C_i \right) \quad (7)$$

本研究では、 θ が Fe_3C という組成を持つことを考慮し、界面において θ は常にこの組成に従った炭素濃度 (25atom% \approx 6.68wt%) をとるものとする。すなわち、粒 i が θ であるときは $C_i = 25 \text{ atom\%} \approx 6.68 \text{ wt\%}$ を満たす。

3. 解析モデル

共析鋼 (Fe-0.77wt%C) の 970K における等温保持によるパーライト組織の成長シミュレーションを行う。本研究で用いる解析モデルを図 1 に示す。解析領域下部に α 相と θ からなる初期ラメラ組織を配置し、残りの部分をオーステナイト(γ)相とする。差分格子は 384×192 の規則格子を用い、差分格子間隔は $\Delta x = \Delta y = 2.5 \text{ nm}$ とする。各相の初期の炭素濃度は、 α 相と θ は共析温度 1000K における平衡組成、 γ 相では Fe-C 系共析鋼の炭素濃度と等しい 0.77wt%とする。境界条件は、左右端面では周期境界条件、上下端面では零ノイマン境界条件を用いる。解析領域下部の初期ラメラ組織について、ラメラ間隔が $\lambda = 0.24 \mu\text{m}$ で均一な場合(A)と中央のラメラ間隔のみ $\lambda = 0.16 \mu\text{m}$ でラメラ間隔に不均一がある場合(B)を考え、パーライト組織形成過程の比較を行う。

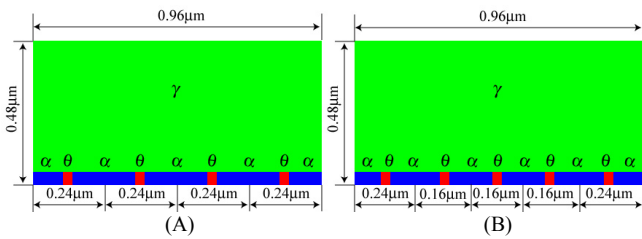


Fig. 1. Computational models.

4. 解析結果と考察

図 2 にラメラ間隔が $\lambda = 0.24 \mu\text{m}$ で均一な場合(A)のパーライト組織形成過程を炭素濃度分布で示す。この場合、 α 相と θ は協調的に成長することが分かる。ここで、 α 相と θ の成長機構について考えると、炭素原子の固溶量が小さい α 相は γ 相に炭素原子を排出しながら成長し、炭素原子の固溶量が高い θ は γ 相から炭素原子を取り込みながら成長する。そのため、 α 相は成長方向の γ 相の濃度が低いほど成長し易く、 θ は成長方向の γ 相の濃度が高いほど成長し易い。(A)の場合において α 相と θ が協調的に成長しているのは、等間隔に α 相と θ が存在することで上記の炭素原子の分配が効率的に行われるためであると考えられる。また、この初期ラメラ組織のラメラ間隔($0.24 \mu\text{m}$)は、この温度領域で観察される一般的な値であり、このときにラメラが協調的に成長することが確認できる。

一方、図 3 にラメラ間隔に不均一がある場合(B)のパーライト組織形成過程を炭素濃度分布で示す。解析領域中央の θ は成長初期に途切れ、それ以外の θ は湾曲しながら成長していることがわかる。このとき成長初期に θ が途切れるのは、解析領域中央部においては α 相から γ 相に排出される炭素原子が少なく、 θ が成長するために必要な炭素原子を周囲から取り込むことができないためである。また、成長に伴って α 相と θ が湾曲するのは、ラメラ間隔の不均一により、 θ 成長方向の γ 相において、場所ごとに炭素濃度の差が生じるためであると考えられる。図 3(c)に示すように、解析領域中央の矢印で示した領域では γ 相の炭素濃度が高くなる。このと

き、図 3(d), (e)のように、 θ が中央に向かって成長するのが分かる。このように、初期ラメラの形態によりラメラ組織の初期の成長過程が決まり、さらにラメラの成長に伴い変化する γ 相内の炭素濃度分布が以降の成長過程を決定付けることが分かった。

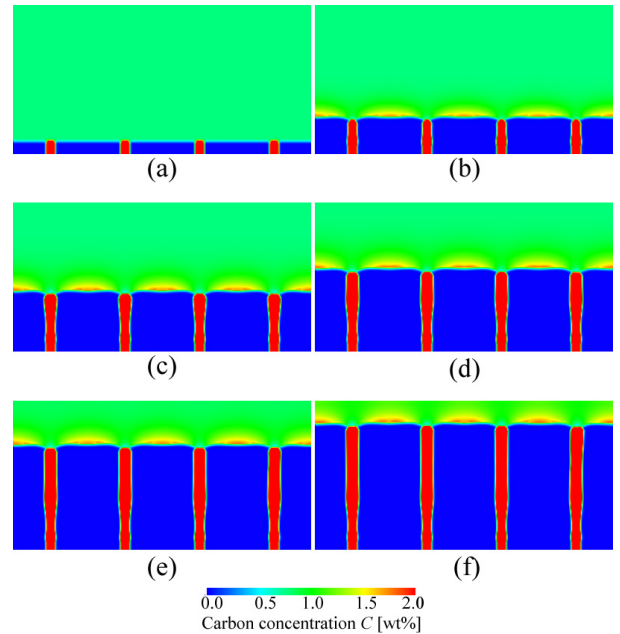


Fig. 2. Distributions of carbon concentration for case A at (a) 0s, (b) 0.13s, (c) 0.26s, (d) 0.39s, (e) 0.52s and (f) 0.65s.

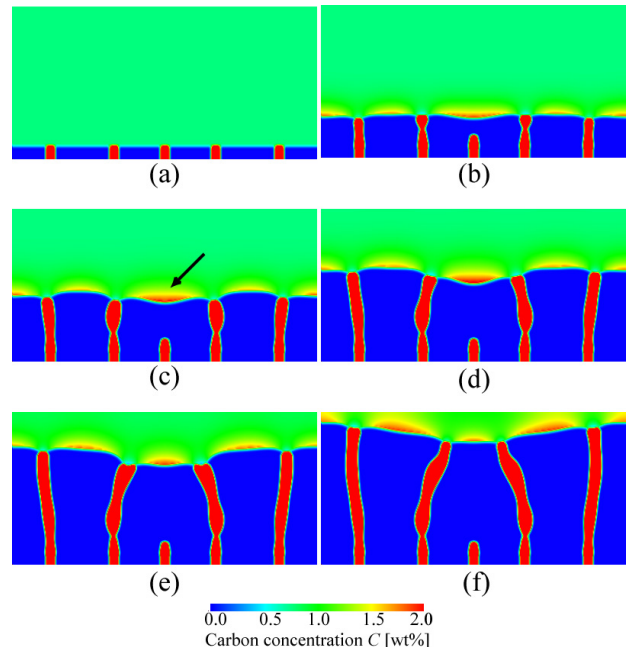


Fig. 3. Distributions of carbon concentration for case B at (a) 0s, (b) 0.13s, (c) 0.26s, (d) 0.39s, (e) 0.52s and (f) 0.65s.

5. 参考文献

- (1) I. Steinbach et al, Physica D, 134, (1999), 385-393.
- (2) K. Nakajima et al, Acta Materialia, 54, (2006), 3665-3672.
- (3) J. Tiaden et al, Physica D, 115, (1998), 73-86.