

Phase-Field 法による鉄鋼材料の材質予測

神戸大学 [院] 山中 晃徳 京都工芸繊維大学 [院] 高木 知弘
神戸大学 [院] 富田 佳宏

Prediction of Microstructure and Mechanical Properties of Steels using Phase-Field Method

Akinori YAMANAKA, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

鉄鋼材料は、熱処理過程で発生する多様な相変態や析出を利用して組織制御を行うことで、強度と延性のバランスに優れた力学特性を発現させることができる。しかしながら近年では、要求される様々な力学特性を鉄鋼材料に付加するために、製造プロセスの複雑化や合金元素の増加が生じ、従来の知識や経験のみでは内部組織の形成や力学特性を精度良く予測することが困難になってきている。このため、実験的手法に加えて、内部組織の形成予測と組織形態を陽に考慮した力学特性評価を実施可能な数値シミュレーションによる材質予測技術の確立が期待されている。著者らの研究では、ナノ・メソスケールにおける強力な組織形成予測手法として注目されている Phase-Field(PF) 法と均質化法を用いた鉄鋼材料の材質予測シミュレーション法の確立を目指している。(1) 本稿では、フェライト (α) + マルテンサイト組織を有する Dual Phase(DP) 鋼の材質予測シミュレーションを例に、Multi-Phase-Field(MPF) 法による α + オーステナイト (γ) 2 相組織の形成予測ならびに均質化法を用いた DP 鋼の変形挙動解析について報告し、本手法の可能性や将来展望を述べる。

2 Phase-Field 法による組織形成予測

鉄鋼材料における相変態組織の形成過程を記述する PF モデルは、CALPHAD 法で得られる化学的自由エネルギー関数を用いる方法など数多く提案されてきている。(2),(3) ここでは粒界移動を正確に表現でき多結晶体における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態やパーライト変態を表現可能な MPF モデルについて説明する。(4)

MPF 法では N 個の結晶粒を含む系を考え、 i ($i = 1, \dots, N$) 番目の結晶粒 (粒 i) の存在確率を表す phase field ϕ_i と炭素濃度 C を秩序変数として定義する。このとき、 ϕ_i はそれぞれ独立な変数でなく、任意点で $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$ を満足する。一方、炭素濃度 C は、各結晶粒内の炭素濃度を表す変数 C_i (局所濃度) と phase field ϕ_i の線形関数として $C = \sum_{i=1}^N \phi_i C_i$ で表される。これらの秩序変数を用いて、系の全自由エネルギーは次式で表される。

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

ここで、式 (1) の被積分項第二項がバルクの自由エネルギーに相当する。また、 a_{ij} は勾配エネルギー係数、 W_{ij} は

エネルギー障壁の高さを表し、組織の界面エネルギーおよび界面幅に関連づけられる。

そして、相変態による組織発展が式 (1) の全自由エネルギーの最小化過程に律則されるものと仮定すると、秩序変数 ϕ_i の時間発展方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = - \sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^\phi}{n} \left(\frac{\partial G}{\partial \phi_i} - \frac{\partial G}{\partial \phi_j} \right) \quad (2)$$

ここで、 M_{ij}^ϕ は ϕ_i のモビリティである。さらに本モデルでは、炭素拡散方程式は局所濃度 C_i を用いて表現される。すなわち炭素原子の拡散流束 J が各結晶粒における拡散流束 J_i と phase field ϕ_i の線形関数として表現されると仮定すると、拡散方程式を次式のように表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i J_i \right) = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i D_i \nabla C_i \right) \quad (3)$$

ここで、 D_i は粒 i における炭素拡散係数である。なお、本研究では変態駆動力、局所濃度は線形化状態図を用いて算出される。

3 均質化法による力学特性評価

PF 法による組織形成シミュレーションの結果として、鉄鋼材料の熱処理過程で形成される微視組織の体積分率のみならず、組織の分布状態や形態を画像データとして取得することができる。そこで本研究では、MPF 法による $\alpha + \gamma$ 2 相組織形成予測で得られた組織の画像データに基づき、DP 鋼の内部組織を表現する代表体積要素 (RVE) を作成する。ついで、そこで作成された RVE を用いて均質化法に基づく弾塑性有限要素解析(5),(6) を行い、DP 鋼の力学特性評価を行なう。なお、RVE の作成方法や均質化法による力学特性評価の詳細は文献 (1) を参照されたい。

4 材質予測シミュレーション結果および考察

図 1 は組織形成シミュレーションで得られた、Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を示している。ここで、系の初期温度は 1100K、冷却速度は 0.1K/s である。 γ 母相中に形成した α 相は、炭素固溶度の大きい γ 相へ炭素を排出しながら成長することがわかる。したがって、 α 相に囲まれた γ 相において炭素濃度が高くなっており、より低温領域では、このような未変態 γ 相においてセメントタイトの析出を伴うパーライト変態またはマルテンサイト変態が発生することが予想できる。なお、パー

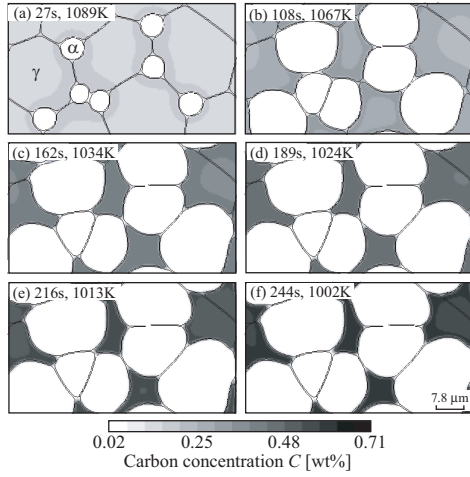


Fig. 1: Growth of ferrite phase during $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation in Fe-C-Mn alloy.

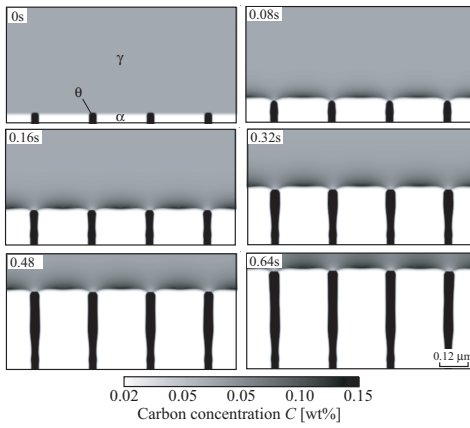


Fig. 2: Growth of pearlitic microstructure during pearlitic transformation in Fe-C alloy.

ライト組織形成過程に関しても先に示した MPF モデルを用いて予測することが可能であり、図 2 に示したようなパーライトラメラの成長過程を再現できる。⁽⁷⁾

次に、図 1(b), (f) に示した α 相を有する DP 鋼 (以下、それぞれ DP-52 鋼, DP-80 鋼と呼ぶ) の力学特性評価の結果を示す。このとき、組織形成シミュレーションにおいて未変態 γ 相であった領域はすべて均一なマルテンサイト相に変化しているものとして RVE を作成した。また、両相のヤング率はともに 206GPa, 降伏応力は α 相で 400MPa, マルテンサイト相で 1200MPa とした。

DP-52 鋼および DP-80 鋼にひずみ $E = 0.1$ まで引張り変形を加えた後、 $E = 0$ まで逆負荷を与えたときの巨視的真応力-真ひずみ曲線を図 3 に示す。 α 相の体積分率の小さい DP-52 鋼の方が引張り変形時に大きな加工硬化挙動を示しており、その後の逆負荷時においても DP-52 鋼の方が大きなバウシinger 効果を示していることがわかる。さらに、図 4 に DP-52 鋼と DP-80 鋼の組織内部の相当塑性ひずみ分布を示す。Point A は最大負荷時の塑性ひずみ分布、Point B および Point C は逆負荷過程で生じた、巨視的ひずみ $E = 0.05$ および 0.04 における塑性ひずみ分布である。これら結果から、逆負荷時には引張り変形においてあまり塑性変形が発生しなかった α において

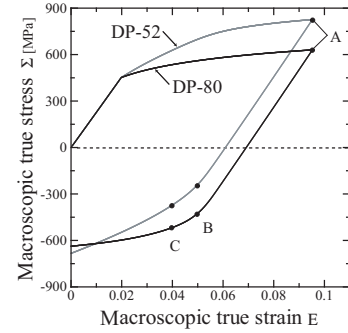


Fig. 3: Macroscopic true stress - true strain curves for DP-52 and DP-80 steels.

(a) DP-52



(b) DP-80

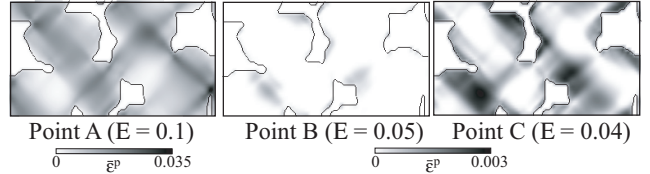


Fig. 4: Distribution of equivalent plastic strain in DP microstructure for DP-52 and DP-80 steels.

塑性変形が生じていることがわかる。また、軟質な α 相が連結した形態を呈している DP-80 鋼の方が、組織全体で塑性変形が生じたため、DP-52 鋼に比べてバウシinger 効果が小さかったと考えられる。⁽⁸⁾

以上のように、本研究で提案する PF 法と均質化法による鉄鋼材料の材質予測シミュレーション法を用いることにより、任意の熱処理条件における組織形成予測および予測された微視組織を有する材料の力学特性評価を系統的に実施可能である。今後は、本材質予測手法をさらに発展させ、鉄鋼材料の製造工程における全ての組織形成予測および実用複相組織鋼の力学特性評価を可能とすることで、鉄鋼材料の更なる高機能化に貢献したいと考えている。

参考文献

- (1) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Mater. Sci. Eng., **480**, 244-252, (2008).
- (2) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Mater. Trans., **47**, 2725-2731, (2006).
- (3) T. Koyama, H. Onodera, Mater. Trans., **46**, 1187-1192, (2005).
- (4) A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita J. Crystal Growth, **310**, 1337-1342, (2008).
- (5) 寺田, 弓削, 菊池, 機論 A, **61**, 2199-2205, (1995).
- (6) 比嘉, 富田, 機論 A, **66**, 1441-1446, (2000).
- (7) 山本, 山中, 高木, 富田, 第 57 期日本材料学会学術講演会講演論文集, 213-214, (2008).
- (8) S. Harjo, Y. Tomota, D. Neov, P. Lukas, M. Vrana, P. Mikula, ISIJ Int., **42**, 551-557, (2002).