

Multi-Phase-Field 法によるパーライト組織形成過程の形成予測

Prediction of Pearlite Microstructure Formation by Multi-Phase-Field Method

○ 山本隆史・神戸大院

Takashi YAMAMOTO,
Graduate School of Engineering,
Kobe University, Nada, Kobe

高木知弘・京工繊大院

Tomohiro TAKAKI,
Graduate School of Science and
Technology,
Kyoto Institute of Technology, Kyoto

山中晃徳・神戸大院

Akinori YAMANAKA,
Graduate School of Science and
Technology,
Kobe University, Kobe

富田佳宏・神戸大院

Yoshihiro TOMITA,
Graduate School of Engineering,
Kobe University, Nada, Kobe

Key Words : Phase-Field Method, Numerical Simulation, Pearlite, Microstructure

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、組織形態を予測することが重要となる。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ている。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^(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、界面エネルギーの影響を評価することでパーライト組織の形成メカニズムを明らかにする。

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 ($25\text{atom}\% \approx 6.68\text{wt}\%$) をとるものとする。すなわち、粒 i が θ であるときは $C_i = 25\text{atom}\% \approx 6.68\text{wt}\%$ とする。

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 相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 相は共析温度 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。各相間の界面エネルギー σ について、その値を $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 一定とした場合と $\sigma = 0.5 \text{ J/m}^2$ 一定とした場合を考え、パーライト組織形成過程の比較を行う。そして界面エネルギーがパーライト組織形成に及ぼす影響を評価する。

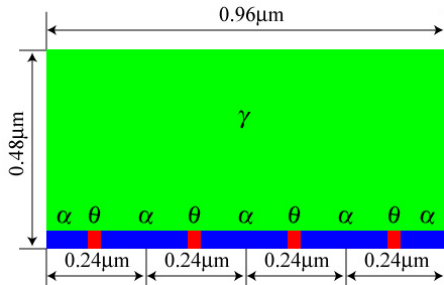


Fig. 1. Computational model.

4. 解析結果と考察

図 2 に $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 一定とした場合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 相は協調的に成長することが分かる。ここで、 α 相と θ 相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 相は α 相から γ 相に排出された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 相は成長方向の γ 相の濃度が高いほど成長し易い。 α 相と θ 相が協調的に成長しているのは、後述する $\sigma = 0.5 \text{ J/m}^2$ 一定とした場合 (図 3) と異なり、成長初期に大きな炭素濃度の堆積が生じず、上記の炭素原子の分配が安定的に行われたためであると考えられる。

一方、図 3 に $\sigma = 0.5 \text{ J/m}^2$ 一定とした場合のパーライト組織形成過程を炭素濃度分布で示す。 $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 一定の場合と異なり、図 3(b), (c) に示すように、成長初期に α 相の成長端で炭素濃度が大きく堆積する。これは、界面エネルギーの値が $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ から $\sigma = 0.5 \text{ J/m}^2$ に変化したことで、パーライト組織成長への界面エネルギーの寄与が化学的自由エネルギーの寄与に比べ小さくなったためであると考えられる。すなわち、界面エネルギーが小さくなることで α/γ 界面がより平らになったため、 α 相前方に高い濃度領域が生じたものと考えられる。 θ 相は γ 相の炭素濃度が高い領域ほど成長し易いため、炭素濃度の堆積する α 相成長端に向かって成長し、図 3(d) のような枝分かれが生じる。このとき、 θ 相の成長に伴い γ 相中

の炭素原子が θ 相に取り込まれ、図 3(e), (f) に示すように α 相成長端における炭素濃度が減少していることも分かる。これらの結果より、パーライトラメラの成長過程において、 α 相と θ 相の協調的な成長は、界面エネルギーと化学的自由エネルギーのバランスによって特徴付けられており、ラメラの成長方向前方の γ 相における濃度分布に依存して、 θ 相に枝分かれが生じることが示された。

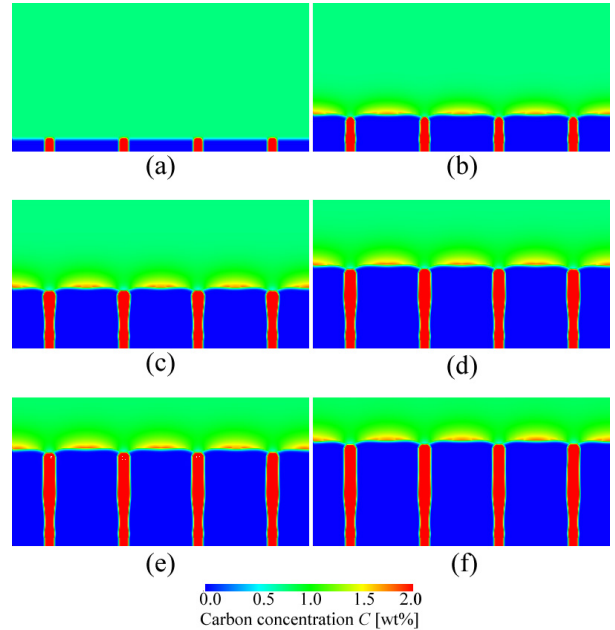


Fig. 2. Distributions of carbon concentration for $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ at (a) 0s, (b) 0.13s, (c) 0.26s, (d) 0.39s, (e) 0.46s and (f) 0.52s.

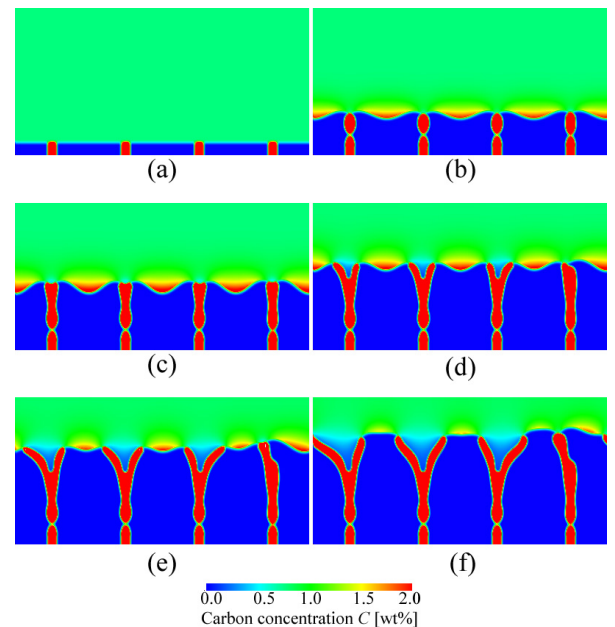


Fig. 3. Distributions of carbon concentration for $\sigma = 0.5 \text{ J/m}^2$ at (a) 0s, (b) 0.13s, (c) 0.26s, (d) 0.39s, (e) 0.46s and (f) 0.52s.

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.