

Multi-Phase-Field 法による鉄鋼材料の拡散相変態シミュレーション

Multi-Phase-Field Simulation of Diffusional Transformation in Steel

○山本隆史・神戸大院

Takashi YAMAMOTO,
Graduate School of Engineering,
Kobe University

高木知弘・京工繊大院

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

山中晃徳・東工大院

Akinori YAMANAKA,
Graduate School of Science and
Engineering,
Tokyo Institute of Technology

富田佳宏・福井工大

Yoshihiro TOMITA,
Fukui University of Technology

Key Words : Phase-Field Method, Numerical Simulation, Diffusional Transformation, Microstructure

1. 緒言

一般に使用される鉄鋼材料の多くは、高温領域でオーステナイト(γ)単相であった材料が、冷却過程でフェライト($\gamma \rightarrow \alpha$)変態及びパーライト($\gamma \rightarrow \alpha + \theta$)変態などを経た結果得られる。このため、多くの鉄鋼材料は内部にフェライト(α)組織とパーライト組織を含む。特に、パーライト組織は微細な α 相とセメントイト(θ)の層状組織であるため、機械的特性に優れている。しかしながら、コロニーやブロックなどの複雑な構造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、相変態による組織形成過程を自由エネルギーに基づいて解析可能なPhase-Field法⁽¹⁾を用いて、フェライト変態及びパーライト変態による組織形成過程をシミュレートし、組織形成予測を行う。これまでの研究では、Fe-C系平衡状態図を用い、Fe-C二元合金についての解析を行ってきた。しかしながら、実際用いられている工業用鋼には、Mn, Ni, Siなどの合金元素が添加されており、これらの元素が組織形成過程に寄与していることが知られている。そこで、計算状態図などで用いられる化学的自由エネルギー関数を用いてモデル再構築し、Fe-C二元系からFe-C-X_i多元系に拡張することで、合金元素の添加による組織形成過程への影響について検討することを目的とする。

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 と溶質 a の濃度 C^a 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、溶質濃度 C^a は各結晶粒における溶質濃度 C_i^a 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。

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

系の全自由エネルギーは、次に示すGinzburg-Landau型のGibbsの自由エネルギー汎関数を用いて定義する⁽²⁾。

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

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。

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

式(2)中の ΔG_{ij} は次式のように表される⁽³⁾。

$$\Delta G_{ij} = G_j - G_i - \sum_a (C_j^a - C_i^a) \frac{\partial G_i}{\partial C_i^a} \quad (5)$$

ここで、 G_i は i 相のGibbsの自由エネルギーを表し、その値は化学的自由エネルギー関数を用いて導出する⁽⁴⁾。相変態の駆動力を式(5)のように定義することにより、Fe-C-X_i系における微視組織の時間発展方程式を導出することが可能になる。

本モデルでは、溶質原子 a の拡散流束 J^a が各粒からの拡散流束 J_i^a の和として表現されると仮定し、拡散方程式を次式のように表す。

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

このときの D_i^a の値は、ケミカルモビリティ M_i^a とGibbsの自由エネルギーを用いて次式のように導出する。

$$D_i^a = M_i^a \cdot T_i^a(G_i) \quad (7)$$

3. 解析モデル

多元系に拡張した時間発展方程式を用いて、これまでの研究と同様にFe-C二元合金を対象にした $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションを行い、その妥当性について評価する。その後、Fe-C-X_i多元系の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションを行い、合金元素の添加による組織形成過程への影響について検討する。本稿ではこれらのうち、Fe-C二元合金の970Kにおける、等温

保持による $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の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。

図1(A)は一次元解析を行うための解析モデルである。相変態に伴う α/γ 界面の移動と、溶質原子の拡散挙動について検討するため、このようなモデルを用いる。解析領域左部に初期フェライト(α)粒を配置し、残りの部分をオーステナイト(γ)相とする。差分格子は 24×2 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 相は温度970Kにおける平衡組成 $1.89 \times 10^{-2} \text{ wt}\%C$ を与え、 γ 相の炭素濃度は $0.33 \text{ wt}\%C$ 、 $0.55 \text{ wt}\%C$ の二通りの値を与える。境界条件は、左右端面では零ノイマン境界条件、上下端面では周期境界条件を用いる。

図1(B)は二次元解析を行うための解析モデルである。 α/γ 界面の二次元的な挙動について検討するため、このようなモデルを用いる。解析領域左下に初期 α 粒を配置し、残りの部分を γ 相とする。差分格子は 96×96 の規則格子を用い、差分格子間隔は一次元解析のときと同様である。 α 相の炭素濃度も一次元解析と同様のものを与え、 γ 相の炭素濃度は $0.33 \text{ wt}\%C$ とする。境界条件は、全方向とも零ノイマン境界条件を用いる。このような条件で $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションを行い、その妥当性についての評価を行う。

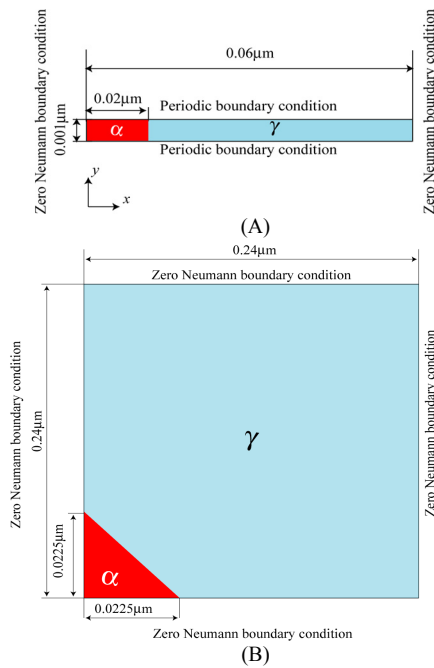


Fig. 1. Computational model (A), (B).

4. 解析結果と考察

図2に、 γ 相の初期濃度をそれぞれ $0.33 \text{ wt}\%C$ 、 $0.55 \text{ wt}\%C$ としたときの α 粒の成長過程を示す。各条件において、等温保持開始後 0 s 、 $1.86 \times 10^{-4} \text{ s}$ 、 $3.72 \times 10^{-4} \text{ s}$ 経過したときのphase field ϕ_α ($\phi_\alpha = 1$: α 相、 $\phi_\alpha = 0$: γ 相)と炭素濃度の変化をグラフで表している。 γ 相の初期濃度が $0.33 \text{ wt}\%$ のとき、 α 粒成長初期に α/γ 界面近傍において炭素濃度の上昇が見られる。しかしながら、 γ 相の炭素濃度が低いためにそのまま成長し、

多少は成長速度の減少が見られるものの、 α 粒の成長が速いことが分かる。一方、 γ 相の初期濃度が $0.55 \text{ wt}\%$ のときも同様に α 粒成長初期に界面での炭素濃度の上昇が見られるが、このとき、 γ 相の初期炭素濃度が高いために成長速度が大きく減少していることが分かる。一般に、相変態の速度は各相の溶質濃度による影響を大きく受けるため、 α 粒成長挙動においてこのような差異が生じることが知られている。このことから、溶質濃度変化に対する相変態の駆動力の変化が良好に再現されていることが示された。

図3に、 α 粒の成長過程を二次元的に表したものを示す。等温保持開始後 0 s 、 $0.62 \times 10^{-2} \text{ s}$ 、 $1.24 \times 10^{-2} \text{ s}$ 経過したときの組織形態を、炭素濃度分布で表している。初期の界面形状は直線状であるが、 α 粒成長初期に円弧状に変形することが分かる。これは、組織形成に伴い界面エネルギーを最小化しようとするためであり、自由エネルギーの最小化が実現されていることが示されている。また、一次元解析のときと同様に、界面での濃度上昇とそれに伴う成長速度の減少も見られ、二次元解析においても溶質濃度と相変態の駆動力との関係が再現されていることが示された。Fe-C-X_i多元系の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態シミュレーションの結果については、発表当日に示す。

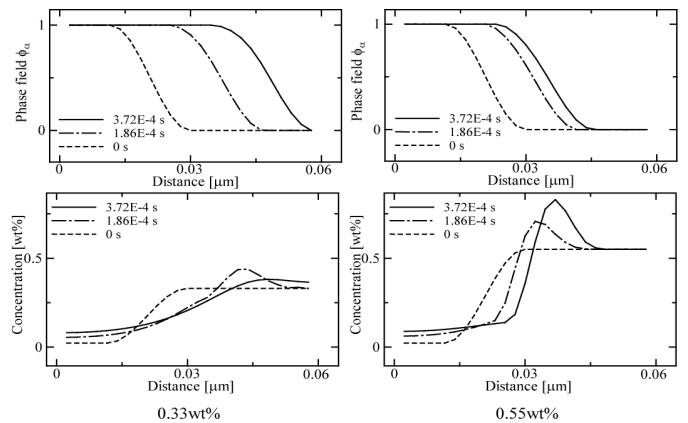


Fig. 2. Distributions of phase field ϕ_α and carbon concentration for $0.33 \text{ wt}\%C$ and $0.55 \text{ wt}\%C$ in γ -phase.

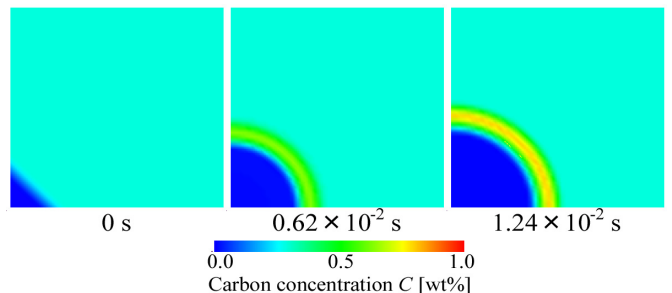


Fig. 3. Distributions of carbon concentration at 0 s , $0.62 \times 10^{-2} \text{ s}$, $1.24 \times 10^{-2} \text{ s}$.

5. 参考文献

- (1) R. Kobayashi, Physica D, 63, (1993), 410-423.
- (2) I. Steinbach et al., Physica D, 134, (1999), 385-393.
- (3) J. Eiken et al., Physical Review E, 73, (2006), 066122.
- (4) I. Loginova et al., Acta Materialia, 51 (2003), 1327-1339.