

# Phase-Field 法によるマルテンサイト変態の3次元シミュレーション

## Three-dimensional Simulation of Martensitic Transformation by Phase-Field Method

○ 山中晃徳・東工大院

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

高木知弘・京工繊大院

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

富田佳宏・福井工大工

Yoshihiro TOMITA,  
Faculty of Engineering,  
Fukui University of Technology

**Key Words** : Phase-Field Method, Martensitic Transformation, Plastic Deformation  
Three-dimensional Simulation, Microstructure Evolution

### 1 緒言

鉄鋼材料における相変態においては、変態ひずみにより生じる応力場が組織形成過程に大きな影響を与えており、組織形成とそれに伴う弾塑性変形挙動を表現できる Phase-Field モデルがいくつか提案されている<sup>(1)</sup>。しかしながら、より定量的に組織形成過程を再現するためには、組織形成過程における結晶のすべり変形や結晶方位変化を評価可能な Phase-Field モデルの構築が求められる。そこで本研究では、Khachaturyan が提唱する Phase-Field Microelasticity 理論<sup>(2)</sup> および結晶塑性理論に基づく、結晶塑性 Phase-Field モデルを構築し、Fe-Ni 合金におけるマルテンサイト変態による組織形成過程の3次元シミュレーションを行う。さらに、変態中に生じる塑性変形が組織形成過程に及ぼす影響について検討する。

### 2 結晶塑性 Phase-Field モデル

系全体の全自由エネルギーは、化学的自由エネルギー  $G_{ch}$ 、勾配エネルギー  $G_{gr}$  および弾性ひずみエネルギー  $G_{el}$  の和として定義され、次式で表される。

$$G = G_{ch} + G_{gr} + G_{el} \quad (1)$$

ここで、化学的自由エネルギーは、秩序変数  $\phi_i$  の Landau 多項展開式で表されるものとする<sup>(3)</sup>。

$$G_{ch} = \int_V \Delta f \left\{ \frac{a}{2} \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 - \frac{b}{3} \sum_{i=1}^3 \phi_i^3 + \frac{c}{4} \left( \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 \right)^2 \right\} dV \quad (2)$$

ここで、 $\phi_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) は  $i$  番目の兄弟晶 (以後、バリエーション  $i$  と呼ぶ) を持つマルテンサイト相の存在確率を表す秩序変数であり、 $0 \leq \phi_i \leq 1$  の値をもつ。 $\Delta f$  は変態駆動力の大きさであり、オーステナイト相とマルテンサイトの自由エネルギー密度差を表している。勾配エネルギーは界面エネルギーの等方性を仮定すると、次式で表される。

$$G_{gr} = \frac{\lambda}{2} \int_V \left( \sum_{i=1}^3 |\nabla \phi_i|^2 \right) dV \quad (3)$$

ここで、 $\lambda$  は勾配エネルギー係数である。

弾性ひずみエネルギーは、Phase-Field Microelasticity 理論より、以下のように表される<sup>(2)</sup>。

$$G_{el} = \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} \epsilon_{ij}^{el} \epsilon_{kl}^{el} dV \quad (4)$$

$$\epsilon_{ij}^{el} = \epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0 \quad (5)$$

ここで、 $C_{ijkl}$  は弾性定数テンソルである。式 (5) で示し

た弾性ひずみ  $\epsilon_{ij}^{el}$  は、力学的平衡方程式  $\sigma_{ij,j} = 0$  をフーリエ変換を用いて解くことにより求められる全ひずみ  $\epsilon_{ij}^c$  と固有ひずみ  $\epsilon_{ij}^0$  の差として定義される。本研究では、マルテンサイト変態中に塑性変形が生じることを表現するため、固有ひずみを変態ひずみ  $\epsilon_{ij}^t$  と塑性ひずみ  $\epsilon_{ij}^p$  の和とし、次式で表現する。

$$\epsilon_{ij}^0 = \epsilon_{ij}^t + \epsilon_{ij}^p = \sum_{m=1}^3 R_{ik} R_{jl} \epsilon_{kl}^{00}(m) \phi_m + \epsilon_{ij}^p \quad (6)$$

ここで、 $R_{ij}$  は回転テンソルであり、母相の結晶方位を表す Euler 角度の関数として定義する。マルテンサイト変態による変態ひずみは、次式で表す Bain の格子ひずみ  $\epsilon_{ij}^{00}(m)$  と秩序変数  $\phi_i$  の線形関数として定義する。

$$\epsilon_{ij}^{00}(1) = \begin{bmatrix} \epsilon_3 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\epsilon_{ij}^{00}(2) = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_3 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$\epsilon_{ij}^{00}(3) = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{bmatrix} \quad (9)$$

ここで、 $\epsilon_1$  および  $\epsilon_3$  は、Fe-Ni 合金の場合には、それぞれ  $\epsilon_1 = 0.1322$ 、 $\epsilon_3 = -0.1994$  で与えられる<sup>(4)</sup>。

式 (5) の塑性ひずみは、結晶塑性理論により定義される塑性ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^p$  を時間積分することによりに評価する。塑性ひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}^p$  は、結晶の  $n$  個あるすべり系のうち、ある  $a$  番目のすべり系におけるせん断ひずみ速度  $\dot{\gamma}^{(a)}$  お

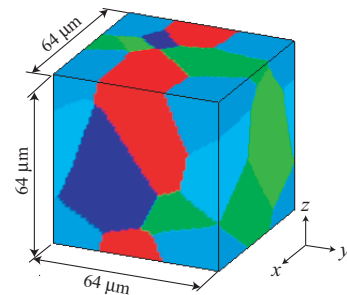


Fig. 1 Computational model for polycrystalline structure of austenite phase.

よび Schmid テンソル  $P_{ij}^{(a)}$  を用いて次式で表される (5).

$$\epsilon_{ij}^p = \sum_{a=1}^n P_{ij}^{(a)} \dot{\gamma}^{(a)} \quad (10)$$

$$P_{ij}^{(a)} = \frac{1}{2} \left( s_i^{(a)} m_j^{(a)} + s_j^{(a)} m_i^{(a)} \right) \quad (11)$$

$s_j^{(a)}$  と  $m_i^{(a)}$  は、それぞれすべり系  $a$  のすべり面に対して平行および垂直な方向の単位ベクトルである。せん断ひずみ速度  $\dot{\gamma}^{(a)}$  は、Pan らの指数則を用いて表現する (6).

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_0^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} \quad (12)$$

ここで、 $\tau^{(a)}$  はすべり系  $a$  に対する分解せん断応力であり、 $\tau^{(a)} = P_{ij}^{(a)} \sigma_{ij}$  で表される。 $g^{(a)}$  は臨界分解せん断応力であり、すべり変形に対する抵抗を表現する。本研究では、塑性変形による加工硬化挙動を表す  $g^{(a)}$  の発展方程式として、せん断ひずみ  $\gamma$  に依存したモデルを用いる。すなわち、臨界分解せん断応力の増分は次式で表されるものとする。

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{b=1}^n h_{ab} \left| \dot{\gamma}^{(b)} \right| \quad (13)$$

ここで、 $h_{ab}(\gamma)$  は、すべり系同士の相互作用を表現する硬化係数行列であり  $h_{ab}(\gamma) = qh(\gamma) + (1-q)h(\gamma)\delta_{ab}$  で表現する。 $q$  は潜在硬化の大きさを表すパラメータである。本研究では、 $h(\gamma)$  は、 $h(\gamma) = h_0 \text{sech}^2 \{h_0 \gamma / (\tau_s - \tau_0)\}$  を用いる。なお、 $\gamma = \sum_{a=1}^n |\dot{\gamma}^{(a)}|$  で与えられる。 $h_0$ 、 $\tau_s$ 、 $\tau_0$  はそれぞれ、初期硬化係数、飽和分解せん断応力、初期臨界分解せん断応力である。

以上より評価される、全自由エネルギー  $G$  が組織発展とともに減少することを仮定すると、マルテンサイト相の時間発展は、次式の  $\phi_i$  の時間発展方程式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M \frac{\delta G}{\delta \phi_i} = -M \left( \frac{\delta g_{ch}}{\delta \phi_i} + \frac{\delta g_{el}}{\delta \phi_i} - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_i \right) \quad (14)$$

ここで、 $M$  はマルテンサイト相と母相の界面のモビリティである。

### 3 解析モデル

本研究では、Fe-Ni 合金におけるマルテンサイト変態による組織形成過程を再現する。図 1 に、オーステナイト母相の多結晶構造のモデルを示す。解析領域は、一辺  $32 \mu\text{m}$  の正方形領域であり、 $64 \times 64$  の規則格子で分割する。全方向周期境界条件を適用するので、解析領域内には 10 個の結晶粒が存在する。それぞれの結晶粒の方位は、ランダムに Euler 角度を設定することで表現する。温度は、255 K で一定とし、等温変態におけるマルテンサイト組織の形成過程を再現する。さらに、マルテンサイト相の核形成サイトとなる結晶欠陥を表現するために、解析領域中央付近の結晶粒界上に微小な塑性ひずみを与える。式 (14) の時間発展方程式は時間、空間ともに差分法を用いて離散化して、数値解析する。応力場の評価には、高速フーリエ変換を用いる。

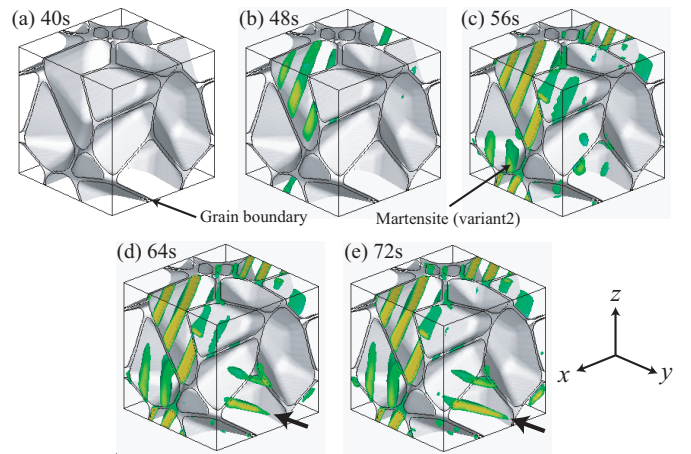


Fig. 2 Evolution of martensite phase (variant 2).

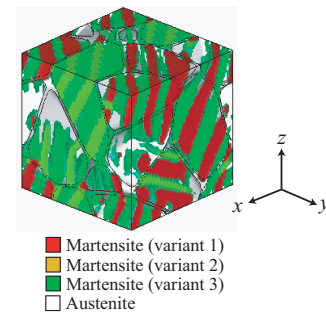


Fig. 3 Simulated martensitic microstructure.

## 4 解析結果および考察

図 2 に、バリエント 2 のマルテンサイト相の時間発展を示す。図中には、母相の結晶粒界と  $\phi_2 \geq 0.5$  を満たす領域としてバリエント 2 を示している。この結果より、母相中に配置した結晶欠陥から形成したマルテンサイト相は、時間とともに成長している。また、最初にマルテンサイト相が形成した結晶粒以外においても、変態によって生じた内部応力場に誘起されて次々とマルテンサイト相が形成している。さらに、図 2(d)(e) の矢印で示すように、マルテンサイト相は自身が形成することで生じる弾性ひずみエネルギーが最小となるように、プレート状もしくは板状の形態を呈していることがわかる。図 3 には、3 つのバリエントおよび母相を含むマルテンサイト組織の形態を示す。この図より、変態ひずみによって生じる弾性ひずみエネルギーを最小化するように、結晶粒ごとに異なる 2 つのバリエントが層状組織を形成していることがわかる。なお、本稿では変態中に塑性変形が生じない系での解析結果を示したが、講演会当日は塑性変形を伴うマルテンサイト変態のシミュレーション結果について報告する。

## 5 参考文献

- (1) 上原, 辻野, 日本機械学会論文集 A 編, 72, (2006), 849-855.
- (2) A. G. Khachaturyan, Theory of Structural Phase Transformation in Solids, Wiley and Sons, New York, (1984).
- (3) A. Artemev, Y. Wang, A. G. Khachaturyan, Acta Materialia, 48, (2000), 2503-2518.
- (4) 西山, マルテンサイト変態 基本編, 丸善, (1971), 260.
- (5) R. J. Asaro, J. R. Rice, J. Mech. Phys. Solid., 25, (1977), 309-338.
- (6) J. Pan, J. R. Rice, Int. J. Solid. Struct., 19, (1983), 973-987.