

# Fe-C合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による組織形成 Phase-field シミュレーション

Phase-field Simulation of Microstructural Formation during  $\gamma \rightarrow \alpha$  Transformation in Fe-C Alloy

○学 山中晃徳 (神戸大・院) 正 高木知弘 (神戸大・海科)  
正 富田佳宏 (神戸大・工)

Akinori YAMANAKA, Kobe Univ., Grad. Sch. Sci. & Tech., Nada, Kobe, 657-8501  
Tomohiro TAKAKI, Kobe Univ., Fac. Maritime Sci., Higashinada, Kobe, 658-0022  
Yoshihiro TOMITA, Kobe Univ., Dept. Mech. Eng., Fac. Eng., Nada, Kobe, 657-8501

**Key Words** : Phase Field Method, Homogenization Method, Fe-C Alloy, Isothermal Transformation, Widmanstätten Ferrite

## 1 緒言

鉄鋼材料の熱処理過程における相変態や析出、再結晶で形成される、多種多様な微視組織形態は材料の機械的特性に大きく影響を与える。したがって、鉄鋼材料の更なる高機能化のためには、不均質な微視組織形態が巨視的な力学挙動に及ぼす影響を明らかにすることが重要であり、材料の微視組織過程と力学特性評価を一貫して実施可能な材質予測シミュレーション法の構築が必要である。これに対し近年、材料内部の微視組織形成過程の数値シミュレーション手法として、Phase-field 法が提案され、様々な組織形成を解析可能であることが報告されている<sup>(1)</sup>。また、微視組織が巨視的な力学挙動に及ぼす影響を考慮した力学特性評価手法に関しては、均質化法に基づく有限要素解析が注目されている<sup>(2)</sup>。

そこで本研究では、代表的な鉄鋼材料である Fe-C 合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による Widmanstätten フェライト( $\alpha_w$ )形成過程を Phase-field 法によってシミュレートし、得られた組織形態を代表体積要素とする均質化法に基づく有限要素解析を行うことにより、Fe-C 合金の微視組織形成過程と巨視的な力学特性を一貫して解析可能な材質予測シミュレーション法を構築する。

## 2 Phase-field 法<sup>(3)</sup>

Fe-C 合金の全自由エネルギーを、化学的自由エネルギーと界面が存在することにより生じる過剰な自由エネルギーの和として定義し、次式に表す Gibbs の自由エネルギー汎関数を用いる。

$$G = \int \left[ g(\phi, u_c, T) + \frac{\epsilon(\theta)^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV \quad (1)$$

ここで、 $\phi$  は $\alpha$ 相において $\phi = 1$ 、 $\gamma$ 相において $\phi = 0$ の値をとる phase field、 $T$  は絶対温度、 $u_c$  は Fe 原子が形成する副格子を占有する炭素原子のモル分率 (以下、炭素濃度) である。式 (1) の右辺第 1 項  $g(\phi, u_c, T)$  は、Fe-C 合金の化学的自由エネルギー密度であり、次式で表される。

$$g(\phi, u_c, T) = p(\phi)g^\alpha(u_c, T) + (1 - p(\phi))g^\gamma(u_c, T) + Wq(\phi) \quad (2)$$

ここで、 $g^\alpha(u_c, T)$  と  $g^\gamma(u_c, T)$  は、それぞれ $\alpha$ 相と $\gamma$ 相単相の自由エネルギー密度、 $p(\phi)$  はエネルギー密度分布関数、 $q(\phi)$  はダブルウェルポテンシャルであり、そのポテンシャル障壁の高さ  $W$  は、界面エネルギー  $\sigma$  と界面幅  $\delta$  に

関係付けられる。

また、 $\epsilon(\theta)$  は界面エネルギー  $\sigma$  と界面幅  $\delta$  に関連付けられた界面異方性を表現するパラメータであり、本研究では強い界面異方性を表現できる次式の修正勾配エネルギー係数を用いる。

$$\epsilon(\theta) = \begin{cases} \epsilon_0 \{1 + \xi \cos k(\theta - \theta_0)\} \equiv \bar{\epsilon}(\theta) \\ \text{(for } 2\pi i/k + \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi(i+1)/k + \theta_m) \\ \frac{\bar{\epsilon}(\theta_m + \theta_0)}{\cos \theta_m} \cos(\theta - \theta_0) \\ \text{(for } 2\pi i/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi i/k + \theta_m) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 $\xi$  は異方性強度、 $k$  は異方性モード、 $\theta$  は界面の法線方向と  $x$  軸がなす角度である。

Phase field  $\phi$  の時間発展方程式は Allen-Cahn 方程式から導出され、式 (1) ~ (3) で表される Fe-C 合金の全自由エネルギーを代入すると次式のようになる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left\{ \nabla \cdot (\epsilon^2 \nabla \phi) - \frac{\partial g}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} \quad (4)$$

ここで、 $M_\phi$  は $\alpha/\gamma$ 界面の易動度  $M$ 、 $W$  および  $\epsilon_0$  に関係付けられる phase field の易動度であり  $M_\phi = M\sqrt{2W}/6\epsilon_0$  と表される。一方、炭素濃度  $u_c$  の時間発展方程式は Cahn-Hilliard 方程式から導かれ、式 (1) ~ (3) を代入すると次式のように表される。

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ L'(\phi, u_c, T) \left( \frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \nabla u_c + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \nabla \phi \right) \right\} \quad (5)$$

ここで、 $L'$  は炭素原子の拡散係数であり、Fe-C 合金のモル体積  $v_m$ 、空格子のモル分率  $y_v$ 、炭素原子の易動度  $M_c$  および温度に関係付けられ、 $L'(\phi, u_c, T) = v_m u_c y_v M_c$  で表される。なお本研究では、拡散係数が相の種類に依存して界面領域で滑らかに変化すると仮定している。

## 3 均質化法

Phase-field シミュレーションで得られた微視組織を有する、Fe-C 合金の巨視的な力学特性を評価するために、文献 (4) で提案された 2 変数漸近展開理論に基づく均質化法を用いた弾塑性有限要素解析を行う。本研究では Fe-C 合金の変形挙動が  $J_2$  流れ理論から導出される弾塑性体の構成式 (Prandtl-Reuss の式) に従うものとし、Kirchhoff 応力の Jaumann 速度  $\overset{\nabla}{S}_{ij}$  とひずみ速度  $\dot{\epsilon}_{ij}$  の関係式とし

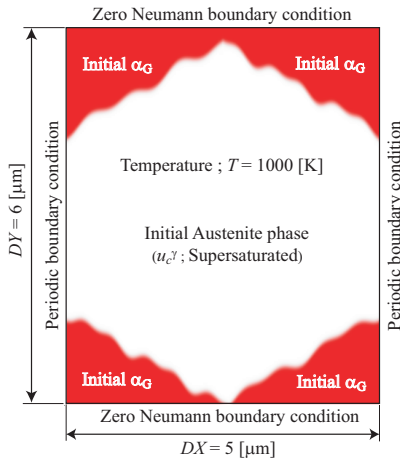


Fig. 1 Computational model and initial conditions

て次式を用いる (5)。

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = \left( D_{ijkl}^e - \frac{2G\alpha}{g} \sigma'_{ij} \sigma'_{kl} \right) \dot{\epsilon}_{kl} = D_{ijkl}^p \dot{\epsilon}_{kl} \quad (6)$$

ここで、 $D_{ijkl}^e$  は弾性係数テンソル、 $g$  はひずみ硬化を表現するパラメータ、 $\alpha$  は塑性判定を行う指標である。さらに、Kichhoff 応力の速度  $\dot{S}_{ij}$  と Janmann 速度  $\overset{\nabla}{S}_{ij}$  の関係式  $\dot{S}_{ij} = \overset{\nabla}{S}_{ij} - F_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}$  を用いると、式 (6) は次のように表すことができる (5)。

$$\dot{S}_{ij} = \left( D_{ijkl}^p - F_{ijkl} \right) \dot{\epsilon}_{kl} = L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \quad (7)$$

式 (7) を仮想仕事の原理式に代入し、可容変位速度  $\delta v$  および速度変位  $v$  を、微視領域と巨視領域の座標系  $x_i, y_i$  の2変数関数として扱うことにより、材料の巨視的な変形挙動を記述する巨視的方程式 (8) と微視領域の変形挙動を表現する微視的発展方程式 (9), (10) が導出される (4)。

$$\int_{\Omega} \left[ L_{ijkl}^H \dot{E}_{kl}^0(v) - P_{ij}^H + \sigma_{ij}^H + \tau_{ijkl}^H \frac{\partial v_k^0}{\partial x_l} \right] \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{S_i} \dot{P}_i \delta v_i dS + \int_{\Omega} \rho^H \dot{G}_i \delta v_i d\Omega \quad (8)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \dot{E}_{ij}^0(\mathbf{v}) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \chi_i^{kl}}{\partial y_j} + \frac{\partial \chi_j^{kl}}{\partial y_i} \right) \dot{E}_{kl}^0(\mathbf{v}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial y_j} + \frac{\partial \phi_j}{\partial y_i} \right) \quad (9)$$

$$\dot{S}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (10)$$

ここで、式 (8) 中の上付き  $H$  の諸量は微視領域において均質化された等価物性量であり、たとえば  $L_{ijkl}^H$  は均質化剛性マトリクスを表す。また、 $\dot{E}_{ij}^0$  は巨視的ひずみ速度、 $\chi_i^{kl}$  および  $\phi_i$  は特性変位関数と呼ばれる Y-periodic を満たす関数である。

本研究では、式 (8)~(10) を有限要素法を用いて数値解析することにより、Fe-C 合金の微視領域および巨視領域における力学挙動を評価する。

#### 4 解析モデルと解析条件

図 1 に、Phase-field 法を用いて Fe-C 合金の  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態による  $\alpha_w$  形成過程をシミュレートするための解析モデルおよび解析条件を示す。解析領域は  $DX \times DY = 5 \times 6 \mu\text{m}$

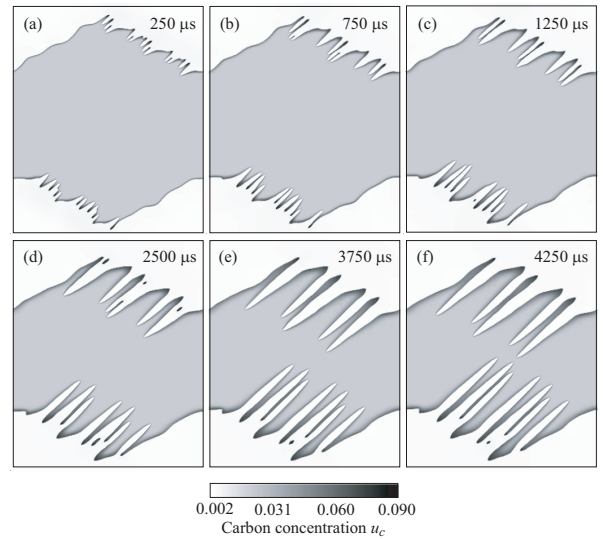


Fig. 2 Growth of Widmanstätten ferrite plates for initial carbon concentration  $u_c = 0.02$  in austenite

の長方形領域とし、正六角形状のオーステナイト粒界に沿って形成された、粒界 Allotriomorph フェライト ( $\alpha_G$ ) を想定して初期フェライト相を配置する。このとき、 $\alpha_w$  の成長方向はオーステナイト相と KS 関係を満たす 24 通りのバリエーションが考えられるが、本研究では左下と右上の  $\alpha_G$  から  $\alpha_w$  が成長すると仮定している。また、解析領域左右端で周期境界条件とし、変態温度は 1000K 一定としている。各相の初期炭素濃度はフェライト相で平衡組成、オーステナイト相で過飽和状態である。数値シミュレーションでは支配方程式 (4), (5) を、時間に関してはクランクニクソン中央差分法、空間に関してはアダプティブ有限要素法を用いて離散化して数値解析する (6)。なお、界面異方性に関する各パラメータは異方性モード数  $k = 2$ 、界面エネルギー  $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 、異方性強度  $\xi = 0.5$  である。

#### 5 解析結果および考察

図 2(a)~(f) に、オーステナイト相の初期炭素濃度  $u_c = 0.02$  における  $\alpha_w$  形成過程の Phase-field シミュレーション結果を示す。変態開始後初期には強い界面異方性により、 $\alpha_G$  の初期界面上に鋭い先端形状を有する多数のチップが形成される。これらのチップは変態が進行するにつれて、隣り合うプレート同士との融合を繰り返しながら、競合的に成長していることがわかる。特に、初期界面の凸状箇所形成されたチップが優先的に  $\alpha_w$  プレートへと形態を変化させていることが分かる。

以上の Phase-field シミュレーションで得られた微視組織を代表体積要素とする、均質化法に基づく有限要素法による力学特性評価については講演会当日に報告する。

#### 6 参考文献

- (1) 小山敏幸, ふえらむ, 4, (2004), 240-245.
- (2) J.M.Guedes, N.Kikuchi, *Comput.Meths.Appl.Mech.and Engrg.*, **83**, (1990), 143-198.
- (3) A.Yamanaka, T.Takaki, Y.Tomita, *Mater. Trans.*, **47**, (2006), in print.
- (4) 比嘉吉一, 富田佳宏, 機論 A, **66**, (2000), 1441-1446.
- (5) 富田佳宏, 数値弾塑性力学, (1990), 養賢堂.
- (6) T.Takaki, T.Fukuoka, Y.Tomita, *J.Crystal Growth*, **283**, (2005), 263-271