

マルテンサイト変態による組織形成過程の Phase-Field シミュレーション

Phase-Field Simulation of Microstructure Formation during Martensitic Transformation

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

Akinori YAMANAKA, Graduate School of Science & Technology, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501
Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Maritime Sciences, Kobe University, Higashinada, Kobe, 658-0022
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501

Key Words : Phase Field Method, Martensitic Transformation, Elasto-plastic deformation
Elastic Strain Energy, Microstructure

1 緒言

鉄鋼材料の強化相として広く用いられているマルテンサイト相は、材料の化学組成や変態温度に依存して、様々な組織形態を呈する。このようなマルテンサイト相の組織形態は、変態中に生じる格子せん断変形に起因する弾性ひずみエネルギーを最小化する過程に特徴づけられる。一般に、マルテンサイト変態で生じた弾性ひずみエネルギーは、双晶関係を持つ方位 (バリエント) のマルテンサイト相の形成および塑性変形により最小化され、前者が支配的な場合には、双晶マルテンサイト組織が形成される。近年、Khachaturyan らは Phase-Field 法を用いて双晶マルテンサイト形成のモデル化を活発に行っているが、マルテンサイト変態中に生じる塑性変形やそれが組織形態に及ぼす影響については報告されていない^{1,2)}。本研究では、変態中に生じる塑性変形の影響を考慮可能なマルテンサイト変態の Phase-Field モデルを構築し、塑性変形が弾性ひずみエネルギーの最小化過程やマルテンサイト相の組織形態に及ぼす影響を検討する

2 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、勾配エネルギーおよび弾性ひずみエネルギーの和で表される、Ginzburg-Landau 型の Gibbs の自由エネルギー汎関数で定義する。

$$G = \int_V \{g_{ch} + g_{gr} + g_{el}\} dV \quad (1)$$

ここで、 g_{ch} は化学的自由エネルギー密度であり、秩序変数の Landau 多項展開式で表される、次式を用いる¹⁾。

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

ここで、 η_i ($i = 1, 2, 3$) は i 番目のバリエント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、 $0 \leq \eta_i \leq 1$ の値をもつ。 Δf は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。勾配エネルギー密度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。

$$g_{gr} = \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^3 |\nabla \eta_i|^2 \quad (3)$$

マルテンサイト相の組織形態を特徴づける、弾性ひずみエネルギー密度は、マイクロメカニクスに基づく弾性ひず

みエネルギー評価法を用いると、次式で表される^{2,3)}。

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

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

ここで、 C_{ijkl} は弾性係数マトリクスである。弾性ひずみ ϵ_{ij}^{el} は、全ひずみ ϵ_{ij}^c と eigen ひずみ ϵ_{ij}^0 の差として定義される。さらに、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、eigen ひずみを変態ひずみと塑性ひずみの和とし、次式で表現する⁴⁾。

$$\epsilon_{ij}^0 = \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ij}^{00}(k) \eta_k + \epsilon_{ij}^p \quad (6)$$

ここで、マルテンサイト変態による変態ひずみは、格子せん断変形を表現する Bain の格子ひずみ $\epsilon_{ij}^{00}(k)$ と秩序変数 η_i の線形関数として定義している。

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 TDGL 型方程式で表される。

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L' \frac{\delta G}{\delta \eta_i} = -L' \left(\frac{\partial g_{ch}}{\partial \eta_i} + \frac{\partial g_{el}}{\partial \eta_i} - \epsilon^2 \nabla^2 \eta_i \right) \quad (7)$$

さらに、本研究ではマルテンサイト変態中に生じる塑性変形を表現するため、降伏条件を満たした塑性域における塑性ひずみの発展を表現する必要がある。したがって、塑性ひずみの発展はせん断ひずみエネルギーに支配されることから、本研究では塑性ひずみの発展式を次式の TDGL 方程式で表現する⁴⁾。

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^p}{\partial t} = -K_{ijkl} \frac{\partial g_{el}^{shear}}{\partial \epsilon_{kl}} \quad (8)$$

ここで、 g_{el}^{shear} はせん断ひずみエネルギー、 K_{ijkl} は変態中に生じる塑性ひずみの大きさの特徴づけるパラメータである。

3 解析モデル

温度 $T = 300$ K の等温保持における、マルテンサイト変態をシミュレートし、系の降伏応力を変化させることによって、変態中に生じる弾塑性変形が変態カイネティクスやマルテンサイト相の組織形態に及ぼす影響について検討する。数値シミュレーションに用いる解析領域は、一辺 $L = 0.25 \mu\text{m}$ の正方形領域であり、全方向周期境界条件を適用する。系は弾完全塑性体として 2 次元平面ひずみ

状態とする。また、マルテンサイト相のバリエーション数は2とする⁵⁾。マルテンサイト変態で生じる Bain ひずみは、 $\epsilon_{11}^{00}(1) = \epsilon_{22}^{00}(2) = 0.1112$, $\epsilon_{22}^{00}(1) = \epsilon_{11}^{00}(2) = -0.1758$, 弾性係数は、 $C_{11} = 242$ GPa, $C_{12} = 112.4$ GPa, $C_{44} = 84$ GPa を用いる。マルテンサイト相の初期核として、解析領域中央の半径 20 nm の領域に大きさが 0.1 以下の秩序変数をランダムに分布させ、それ以外の領域では 0, すなわちオーステナイト母相とした。

4 解析結果および考察

図 1, 2 はそれぞれ、マルテンサイト変態中に弾性変形のみ生じる場合および弾塑性変形が生じる場合における、母相の [001] 方向から見たマルテンサイト相の発展を示している。ここで、 s' は無次元化した時間の単位である。図 1, 2 に示す結果のいずれにおいても、変態初期 (40 s') は時間の経過とともに、初期核を配置した解析領域の中央から、相当応力の高い 45 度方向へマルテンサイト相が成長し、実験で観察されるようなバタフライ型のマルテンサイト組織が形成されていることがわかる。このときマルテンサイト相においては、格子のせん断変形により高い応力が生じるため、マルテンサイト変態の進行とともに、図 3 に示すように弾性ひずみエネルギーが増加する。その後、マルテンサイト変態によって生じた弾性ひずみエネルギーは、双晶組織の形成および塑性変形によって最小化する。すなわち、図 1 のように、マルテンサイト変態中に弾性変形のみ生じる場合においては、マルテンサイト変態で生じた応力場を緩和させるように、マルテンサイト相のバリエーションの再配列が生じ、 $(\bar{1}10)$ 面を晶癖面とする双晶マルテンサイト (以後、 $\alpha'_{(110)}$ とする) を形成して、弾性ひずみエネルギーを最小化していることがわかる。

一方、マルテンサイト変態中に塑性変形が生じる場合には、図 4 に示すように変態中に母相およびマルテンサイト相内部で塑性変形を生じることによって、弾性ひずみエネルギーの増加が、図 1 の結果に比べて小さくなっている。したがって、弾性ひずみエネルギーの最小化過程で生じる、バリエーションの再配列が抑制されるため、 $\alpha'_{(110)}$ だけでなく (110) 面を晶癖面とする双晶組織を含むマルテンサイト組織を形成していることがわかる。

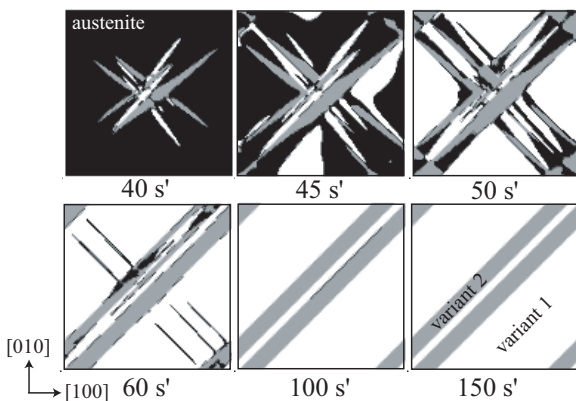


Fig. 1 Evolution of martensite phase during martensitic transformation with elastic deformation.

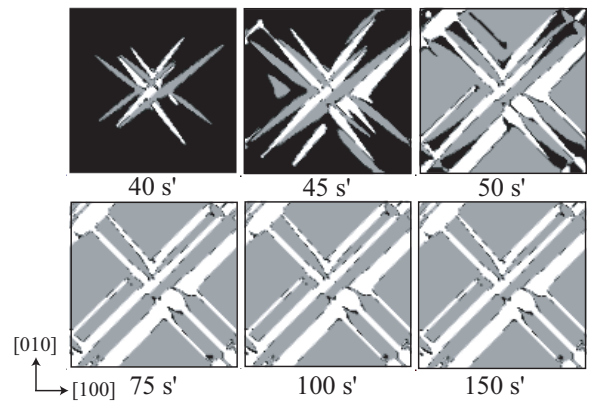


Fig. 2 Evolution of martensite phase during martensitic transformation with elasto-plastic deformation.

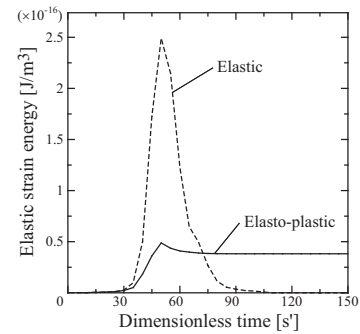


Fig. 3 Variation of elastic strain energy during martensitic transformation with elastic deformation (dotted line) and (b) elasto-plastic deformation (solid line).

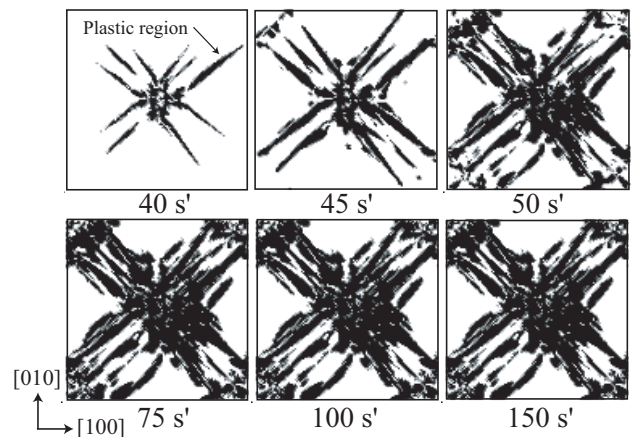


Fig. 4 Evolution of plastic region (black region) during martensitic transformation with elasto-plastic deformation.

5 参考文献

- (1) A. Artemev, Y. M. Jin, A. G. Khachaturyan, *Acta Materialia*, 49 (2001), 1165-1177.
- (2) J. Wang, A. G. Khachaturyan, *Acta Materialia*, 47 (1999), 759-773.
- (3) A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Phase Transformation in Solids*, Wiley and Sons, New York, (1983).
- (4) X. Guo, S. -Q. Shi, X. Q. Ma, *Applied Physics Letter*, 83 (2005), 221910..
- (5) T. Koyama, H. Onodera, *Material Transactions*, 44 (2005), 2503-2508.