

鉄鋼材料におけるマルテンサイト変態の Phase-Field モデリング

Phase-Field Modeling of Martensitic Transformation in Steels

神戸大・院 ○山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏

1. 緒言

マルテンサイト( $\alpha'$ )変態では結晶格子の大きなせん断変形が生じるため、弾性ひずみエネルギーが発生する。この弾性ひずみエネルギーは、 $\alpha'$ の双晶変形もしくは母相および $\alpha'$ における塑性変形によって最小化され、その最小化過程に依存して $\alpha'$ 相の組織形態が特徴付けられる。近年、双晶 $\alpha'$ 組織形成のPhase-Fieldモデルはいくつか提案されているが、 $\alpha'$ の組織形態に塑性変形が及ぼす影響は報告されていない<sup>1)</sup>。本研究では、 $\alpha'$ 変態中に弾塑性変形が生じ、弾性ひずみエネルギーが最小化することを表現可能な $\alpha'$ 変態のPhase-Fieldモデルを構築し、 $\alpha'$ 変態中に生じる塑性変形が変態挙動および組織形態に及ぼす影響を検討する。

2. マルテンサイト変態の Phase-Field モデル

本研究では、 $\alpha'$ 変態中に双晶変形および塑性変形が生じて、弾性ひずみエネルギーが最小化することを表現するため、次式の弾性ひずみエネルギー密度を導入した、 $\alpha'$ 変態の弾塑性 Phase-Field モデルを構築する。

$$g_{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0) \quad (1)$$

ここで、 $\varepsilon_{ij}^0$ は $\alpha'$ の組織形態を特徴づける eigenひずみであり、変態ひずみと塑性ひずみの和として、次式を用いる<sup>2)</sup>。

$$\varepsilon_{ij}^0 = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ij}^{00}(k) \eta_k + \varepsilon_{ij}^p \quad (2)$$

$\alpha'$ の組織発展を記述する秩序変数 $\eta_i$ の時間発展方程式は、系の全自由エネルギー $G$ より、TDGL型の次式で表される。

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta G}{\delta \eta_i} = -L \left( \frac{\partial g_{ch}}{\partial \eta_i} + \frac{\partial g_{el}}{\partial \eta_i} - \kappa^2 \nabla^2 \eta_i \right) \quad (3)$$

塑性ひずみの時間発展は、せん断ひずみエネルギーの大きさに支配されることから、次式のTDGL方程式で記述できるものとする<sup>2)</sup>。

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}^p}{\partial t} = -K_{ijkl} \frac{\delta E_{elast}^{shear}}{\delta \varepsilon_{kl}^p} \quad (4)$$

3. シミュレーション方法および結果

温度 $T = 300$  Kにおける等温保持による、 $\alpha'$ 変態をシミュレートする。解析領域は、一辺 $L = 250$  nmの正方形領域とし、周期境界条件を適用する。2次元解析であるため、 $\alpha'$ 相のバリエーション数は2とする。解析領域中央に初期条件として、 $0 \leq \eta_i \leq 0.1$ の大きさをもつ秩序変数をランダムに分布させる。

図1(a), (b), (c)に、 $\alpha'$ 変態中における $\alpha'$ 組織、相当応力および塑性域の発展を示す。解析領域中央から、バタフライ型の $\alpha'$ 相が $\pm 45$ 度方向に進展している。このとき、 $\alpha'$ 相付近で高い応力を示しており、降伏応力を超えた領域では塑性変形が生じている。また、図1(b)中矢印で示すように、双晶組織を形成することにより、応力が減少していることがわかる。講演会当日は、弾性ひずみエネルギーや組織の変化を詳細に報告する。

参考文献

- 1) Y. Wang and A. G. Khachatryan, Acta Mater., 45 (1997) 759 - 773
- 2) X. H. Guo, S. -Q. Shi and X. Q. Ma, Appl. Phys. Lett., 87 (2005) 221910.

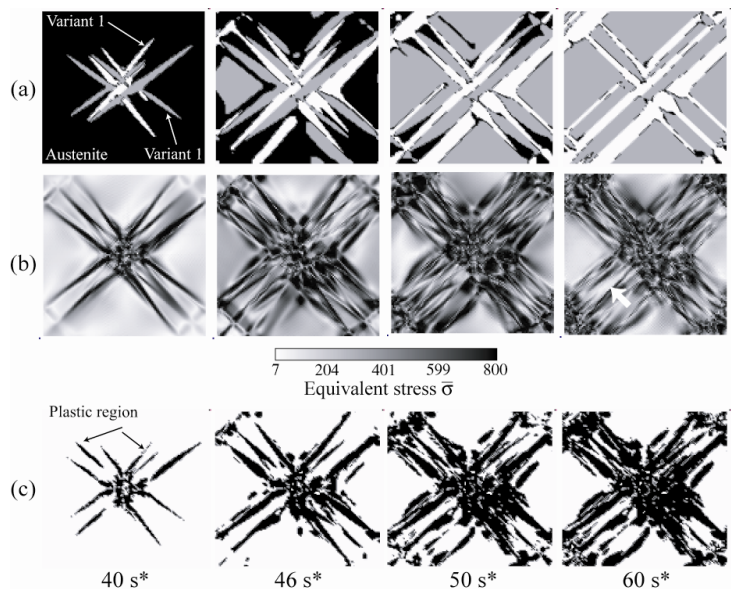


Fig. 1 Evolution of (a) microstructure, (b) equivalent stress and (c) plastic deformed region during martensitic transformation.