

# Phase-field 法と均質化法による Fe-C 合金の組織形成予測と力学特性評価手法の構築

## Prediction of Microstructural Evolution and Evaluation of Mechanical Behavior of Fe-C Alloy with Phase-Field Method and Homogenization Method

准 ○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, Graduate School of Science and Technology, Kobe University,  
1-1, Rokkodai-chou, Nada-ku, Kobe-shi, Hyogo  
Tomohiro TAKAKI, Faculty of Maritime Sciences, Kobe University  
Yoshihiro TOMITA, Faculty of Engineering, Kobe University

### 1 緒言

鉄鋼材料の機械的特性は、材料内部の微視組織形態に依存するため、所望の特性を有する材料を効率的に創製するためには、組織形成過程を精度良く予測し、組織形態が機械的特性に及ぼす影響を明らかにする必要がある。

本研究では、Fe-C 合金における組織形成予測と力学特性評価を系統的に実施可能な材質予測手法の構築を目的とする。まず、Phase-field (PF)法を用いて Fe-C 合金の  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態による組織形成過程の予測を行う。ついで、得られた組織形態を用いて均質化法に基づく有限要素解析を行い、Fe-C 合金の変形挙動に及ぼす組織形態の影響を評価する。

### 2 解析手法

#### 2.1 Phase-field法による組織形成予測<sup>1)</sup>

本研究において、Fe-C 合金の全自由エネルギーは、次式に表す Gibbs の自由エネルギー汎関数で表現する。

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

ここで、 $\phi$  はフェライト ( $\alpha$ ) 相の存在確率を表す秩序変数 phase field であり、オーステナイト ( $\gamma$ ) 相で  $\phi = 0$ 、 $\alpha$  相で  $\phi = 1$  の値をとる。また、 $u_c$  は炭素濃度、 $\theta$  は  $\alpha/\gamma$  界面の法線と  $x$  軸とのなす角度である。式(1)の右辺第 1 項は化学的自由エネルギー、第 2 項の  $a(\theta)$  は勾配エネルギー係数であり、組織形態を特徴づける異相界面の異方性を表現する。

$\gamma \rightarrow \alpha$  変態による組織形成過程を記述する、系の時間発展方程式は Allen-Cahn 方程式および Cahn-Hilliard 方程式に、式(1)を代入することにより導出され、次式で表される。

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

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ L(\phi, u_c, T) \left( \frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \nabla u_c + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \nabla \phi \right) \right\} \quad (3)$$

#### 2.2 均質化法に基づく弾塑性有限要素解析

PFシミュレーションで得られた微視組織を有する、Fe-C 合金の力学特性を評価するため、均質化法による弾塑性有限要素解析を行う。本研究では、微視組織を構成する各相の変形挙動が  $J_2$  流れ理論に従うとし、Fe-C 合金の変形挙動を記述する構成式として Prandtl-Reuss の式を用いる<sup>3)</sup>。さらに、巨視および微視領域における変形挙動の支配方程式は、2 変数漸近展開理論に基づく均質化法を用いた、有限要素法により導出し、数値シミュレーションを行う<sup>2)</sup>。

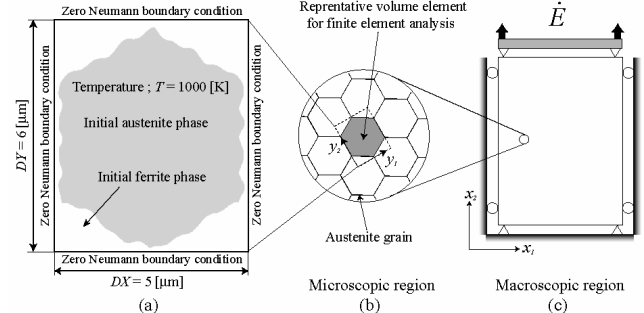


Fig.1 Computational models and initial conditions.

### 3 解析モデルと解析結果

図 1 に本研究で用いる解析モデルを示す。PF法による組織形成予測においては、温度  $T = 1000\text{K}$  一定の等温  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態による組織形成過程をシミュレートする。このとき、初期  $\alpha$  相は六角形状の  $\gamma$  粒界に形成されていることを想定して配置する。また、均質化法による力学特性評価で用いる代表体積要素 (RVE) は、PF法で得られる解析データを用いて作成する。なお、PFシミュレーションにおいて未変態の  $\gamma$  相はパーライト組織に相変化したものとして物性値を定め、平面ひずみ状態でひずみ速度  $\dot{E} = 10^{-3}$  の引張変形を与えて、微視および巨視領域における変形挙動を評価する。

図 2 に、PFシミュレーションで得られた、プレート状の  $\alpha$  相である Widmanstätten フェライト ( $\alpha_w$ ) の形成過程を炭素濃度分布で示す。ここで、界面エネルギーは  $\sigma = 1.0\text{J/m}^2$ 、異方性強度は  $\gamma = 0.5$  としており、強い界面異方性強度により、初期  $\alpha/\gamma$  界面から鋭い先端形状を有する  $\alpha_w$  が形成される様子が観察できる。また、 $\gamma \rightarrow \alpha$  変態においては  $\gamma$  相から  $\alpha$  相への炭素拡散を伴うため、界面近傍で炭素濃度が増加していることがわかる。なお、より詳細な組織形成過程および力学特性評価の結果は、講演会当日に報告する。

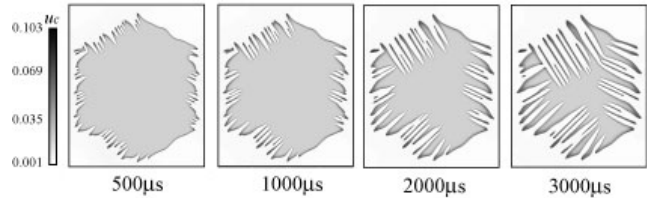


Fig.2 Formation of  $\alpha_w$  during the  $\gamma \rightarrow \alpha$  transformation

### 4 参考文献

- 1) 山中ら: 機論 A, 72, 723, pp.1676-1681, (2006).
- 2) 寺田ら: 機論 A, 61, 590, pp.2199-2205, (1995).
- 3) 富田佳宏: 数値弾塑性力学, 養賢堂, (1990).