

Phase-field 法による Widmanstätten フェライト 形成過程に及ぼす界面異方性の影響評価

神戸大 [院] ○山中晃徳 神戸大 [海科] 高木知弘 神戸大 [工] 富田佳宏

Evaluation of the Effects of Interfacial Anisotropy on the Widmanstätten Ferrite Formation by Phase-field Method

Akinori YAMANAKA, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

鉄鋼材料の微視組織は広範な温度領域における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により生成され、多様な形態を有する。 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により生成する微視組織としては、Ae3 温度直下においては γ 粒界に沿って Allotriomorph フェライトが生成し、過冷度が増すにつれてラス状もしくはプレート状の Widmanstätten フェライトが形成する。この Widmanstätten フェライトは溶接部の熱影響領域において多く観察され、材料の靱性、延性に大きく影響する。したがって、鉄鋼材料のさらなる高機能のためには、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による微視組織形成過程の予測を含めた材料制御技術の向上が重要となる。しかしながら、数多くの影響因子を有する鉄鋼材料の相変態現象や組織形成過程を実験的手法のみで解明し、予測することは極めて困難である。そこで、本研究では代表的な鉄鋼材料である Fe-C 合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による組織形成過程を Phase-field 法を用いてモデル化し、数値シミュレーションを行うことにより $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により生成される Widmanstätten フェライトの形成過程に及ぼす界面異方性の影響について詳細に検討する。

2 Phase-field モデル

Fe-C 合金の全自由エネルギーを α 相および γ 相単相の化学的自由エネルギーと界面が存在することによって生じる過剰な自由エネルギーの和として、次式の Gibbs の自由エネルギー汎関数を用いて定義する¹⁾。

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

ここで、 ϕ は α 相において $\phi=1$ 、 γ 相において $\phi=0$ の値をとる phase field であり、界面領域において滑らかに変化する。また、 T は絶対温度、 u_c は単位体積あたりの炭素濃度であり、通常の炭素原子のモル分率 x_c を用いて $u_c = ax_c/c(1-x_c)$ で定義される。Fe-C 合金の化学的自由エネルギー密度 $g(\phi, u_c, T)$ は次式で表される。

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

ここで、 $g^\alpha(u_c, T)$ と $g^\gamma(u_c, T)$ は、それぞれ α 相と γ 相単相の自由エネルギー密度である。また、 $p(\phi)$ および $q(\phi)$ はそれぞれエネルギー密度分布関数、ダブルウェルポテンシャル、 W はエネルギー障壁の高さであり、界面エネルギー σ および界面幅 δ を用いて $W = 6\sigma b/\delta$ で関連付けられる。なお本研究では、界面領域を $\lambda \leq \phi \leq 1-\lambda$

と仮定して、 $b = 2 \tanh^{-1}(1-2\lambda)$ としている²⁾。

$\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により生成される微視組織形態は、界面エネルギーの方位依存性に起因する界面異方性に大きく影響を受ける。本研究では、強い界面異方性を表現できる修正勾配エネルギー係数^{2) 3)}を用いて、 $\varepsilon(\theta)$ に界面エネルギー σ 、界面厚さ δ および異方性関数 $\eta(\theta)$ を関係付けることにより、界面異方性を次式で表現する。

$$\varepsilon(\theta) = \begin{cases} \sqrt{\frac{3\sigma\delta}{b}} \{1 + \gamma \cos k(\theta - \theta_0)\} \equiv \bar{\varepsilon}(\theta) & (\text{for } 2\pi i/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi(i+1)/k + \theta_m) \\ \frac{\bar{\varepsilon}(\theta_m + \theta_0)}{\cos \theta_m} \cos(\theta - \theta_0) & (\text{for } 2\pi i/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi i/k + \theta_m) \end{cases} \quad (3)$$

Phase field ϕ と炭素濃度 u_c の時間発展方程式は、系の状態は自由エネルギーの減少率が最大になるように変化すると仮定に基づき導出され、次式で表される。

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

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

ここで、 M_ϕ は α/γ 界面の易動度 M^3 、 W および ε_0 に関係付けられる phase field ϕ の易動度であり $M_\phi = M \sqrt{2W}/6\varepsilon_0$ と定義する。また、 $L'(\phi, u_c, T)$ は炭素原子の拡散係数を表現し、Fe-C 合金のモル体積 v_m 、炭素原子が占有していない副格子の分率、すなわち空格子濃度 y_γ 、炭素原子の易動度 M_c および温度に関係付けられる。本研究では炭素原子の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ものと仮定し、次式を用いる。

$$\begin{aligned} L'(\phi, u_c, T) &= u_c y_\gamma M_c \\ &= u_c \left\{ p(\phi) \left(1 - \frac{u_c}{3} \right) + (1-p(\phi))(1-u_c) \right\} (M_c^\alpha)^{p(\phi)} (M_c^\gamma)^{1-p(\phi)} \end{aligned} \quad (6)$$

なお、数値シミュレーションにおいては、式(4)および式(5)の時間発展方程式を、時間に関してはクラック・ニコルソン中央差分法、空間に関してはアダプティブ有限要素法⁴⁾を用いて離散化し、数値解析を行う。

3 解析モデル

図1に本研究で用いた解析モデルおよび初期条件を示す。解析領域は一辺が $1\mu\text{m}$ の正方形領域とし、 γ 粒界に生成された Allotriomorph フェライトを想定して、 x 軸上に初期 α 相を配置する。このとき、Allotriomorph フェライトの初期 α/γ 界面形状が Widmanstätten フェライトの形成過程および形態に及ぼす影響を検討するため、初期 α/γ 界面に初期不整があり y 軸方向に凹凸を有する場合は想定する。また、変態温度は $T = 1000\text{K}$ 一定、各相の初期炭素濃度は α 相で平衡組成、 γ 相においては過飽和状態とする。境界条件としては、 x 方向の解析領域端で周期境界条件、 y 方向の解析領域端で零ノイマン条件を採用する。なお、数値シミュレーションで用いる物性値、パラメータについては以下に示す値を用いている：界面幅 $\delta = 6dx = 20\text{ nm}$ 、異方性モード $k = 2$ 、界面エネルギー $\sigma = 1.0\text{ J/m}^2$ 、優先成長方向 $\theta_0 = 70^\circ$ 、 $\lambda = 0.1$ 。

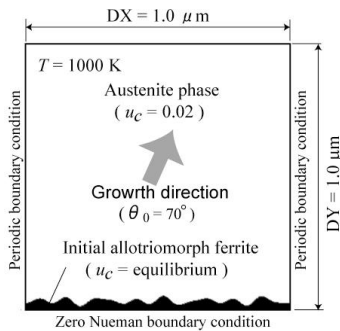


Fig.1 Simulation model and initial conditions.

4 解析結果

図2に異方性強度 $\xi = 0.6$ における Widmanstätten フェライトの形成過程を示す。成長初期段階では強い界面異方性に起因して、組織全体の界面エネルギーを減少させるように界面形状が変化し、鋭い先端形状を有するプレートのチップ部分が多数形成される。また、初期界面形状において y 方向に大きい凸状箇所形成されたチップは炭素拡散領域の影響を受けにくいため、優先的にプレート形状へと成長することがわかる。400 μs 以降においては、各プレートは定常成長し、一方向に大きく成長した Widmanstätten フェライトプレートが形成されることがわかる。このとき、プレートに挟まれた γ 相においては炭素濃度が増加しているため、未変態のまま残留することが観察される。

異方性強度 $\xi = 0.4$ の場合における α 相の成長過程を図3に示す。 $\xi = 0.6$ の場合と同様に、初期界面形状の凸状箇所がプレート状 α 相の優先形成サイトとなる。しかしながら、異方性強度の減少によりプレート側面の界面エネルギーが増加するため、プレート横方向への成長が促進しプレート数は減少する。したがって、優先成長方向への成長速度が減少していることがわかる。

さらに、図4に異方性強度が $\xi = 0.3$ の場合における α 相の成長過程を示す。異方性強度が小さい場合には、鋭い先端形状を有するチップが形成されず、炭素拡散領域の影響を受け、 α 相の成長は抑制される。したがって、Widmanstätten フェライトは形成されず Allotriomorph フェライトが界面をより滑らかにするように成長することがわかる。

以上の結果より、Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトが形成されるためには、強い界面異方性と炭素拡散領域の影響を受けない鋭いチップ先端形状が形成される必要があることが示唆される。なお、異なる初期界面形状における Widmanstätten フェライトの形成過程や形態に及ぼす影響などのより詳細な解析結果については講演会当日発表する。

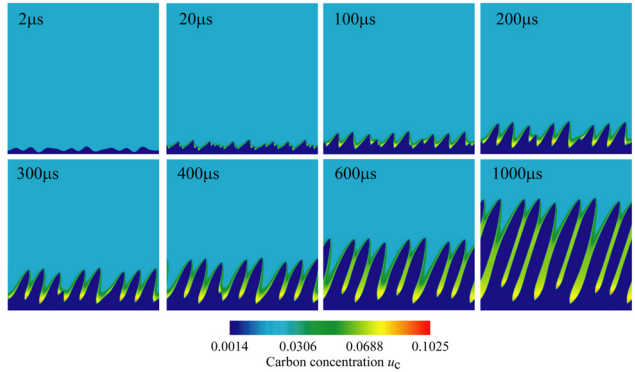


Fig.2 Growth of Widmanstätten ferrite from disturbed α/γ interface in the strength of anisotropy $\xi = 0.6$.

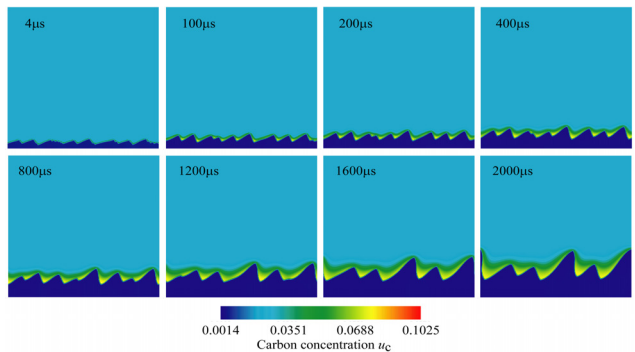


Fig.3 Growth of Widmanstätten ferrite from disturbed α/γ interface in the strength of anisotropy $\xi = 0.4$.

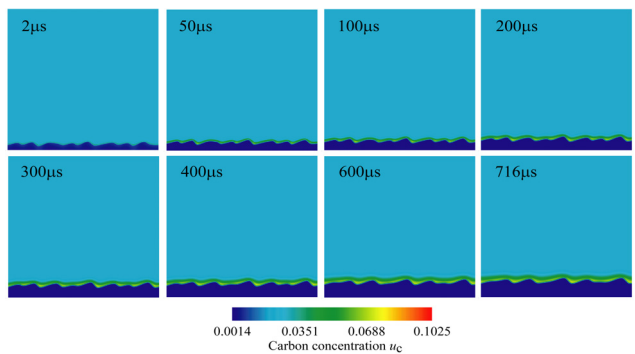


Fig.4 Growth of Allotriomorph ferrite from disturbed α/γ interface in the strength of anisotropy $\xi = 0.3$.

参考文献

- 1) I. Loginova et al, Acta Mater., **51**, 1327 (2003).
- 2) T. Takaki, et al, J. Crystal Growth, **287**, 495 (2006).
- 3) J.J. Eggleston et al, Physica D, **150**, 91, (2001).
- 4) T. Takaki et al, J. Crystal Growth, **283**, 263 (2005).