

多結晶体におけるマルテンサイト組織 形成過程の Phase-Field シミュレーション

神戸大学[院]

山中晃徳

京都工芸繊維大学[院]

高木知弘

神戸大学[院]

富田佳宏

Phase-Field Simulation of Evolution of Martensitic Microstructure in Polycrystalline Material

Akinori YAMANAKA, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

鉄鋼材料を強靱化する重要な構成相であるマルテンサイト相の組織形態は、変態ひずみの緩和過程に特徴づけられる。著者らはこれまでに、弾塑性変形を伴うマルテンサイト変態挙動を表現可能な Phase-Field (PF) モデルを構築し、塑性変形が単結晶中のマルテンサイト相の成長を抑制することを明らかにした¹⁾。しかしながら、実際の鉄鋼材料は多結晶体であるため、多結晶体中のマルテンサイト変態とそれによる組織形成過程を表現しうる PF モデルに拡張する必要がある。本研究では、著者らが提案するマルテンサイト変態の弾塑性 PF モデルを拡張し、多結晶体における立方晶から正方晶へのマルテンサイト変態 (Cubic-Tetragonal 変態) の数値シミュレーションを行う。そして、多結晶構造に起因する母相粒間の弾性相互作用や塑性変形による変態ひずみの緩和が組織形態に及ぼす影響を検討する。

2 Phase-Field モデル

図 1 に示すように、Cubic-Tetragonal 変態では母相である立方晶(C相)の $\langle 100 \rangle$ 軸に平行な c 軸を有する正方晶(T相)のバリエントが 3 種類形成しうる。本研究では、そのうち i 番目のバリエント内で $\phi_i = 1$ 、それ以外のバリエントまたは C 相においては $\phi_i = 0$ の値となる秩序変数 ϕ_i ($i = 1, 2, 3$) を定義する。これを用いて系の全自由エネルギーは、次式の Gibbs の自由エネルギー汎関数で表される。

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

ここで、 g_{ch} 、 g_{el} および g_{gr} は、それぞれ化学的自由エネルギー密度、弾性ひずみエネルギー密度、勾配エネルギー密度である。化学的自由エネルギー密度は、母相の結晶構造の対称性に対して不変でなければならないので、次式に示す ϕ_i の Landau 展開形式で表現する。

$$g_{ch} = \Delta f \left\{ \frac{A}{2} \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 - \frac{B}{3} \sum_{i=1}^3 \phi_i^3 + \frac{C}{4} \left(\sum_{i=1}^3 \phi_i^2 \right)^2 \right\} \quad (2)$$

ここで、 Δf は C 相と T 相の化学的自由エネルギーの差である。

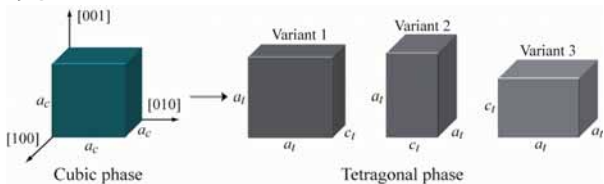


Fig.1 Tetragonal variants produced by cubic-tetragonal transformation.

また、勾配エネルギー密度は、次式で表される。

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

弾性ひずみエネルギーは Khachaturyan が提案するマイクロメカニクス理論に基づく Phase-Field Microelasticity 理論を用いて評価する²⁾。すなわち、弾性ひずみエネルギー密度 g_{el} は次式で表される。

$$g_{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^{el} \varepsilon_{kl}^{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} (\varepsilon_{kl}^c - \varepsilon_{kl}^0) (\varepsilon_{ij}^c - \varepsilon_{ij}^0) \quad (4)$$

ここで、 C_{ijkl} は弾性係数マトリクス、 ε_{ij}^{el} は弾性ひずみであり、全ひずみ ε_{ij}^c と固有ひずみ ε_{ij}^0 の差として求められる。全ひずみ ε_{ij}^c は、境界条件より決定される系の巨視的形狀変化を表す均一ひずみ $\bar{\varepsilon}_{ij}^c$ と均一ひずみからの変動量である変動ひずみ $\delta \varepsilon_{ij}^c$ の和として、次式で表される。

$$\varepsilon_{ij}^c = \bar{\varepsilon}_{ij}^c + \delta \varepsilon_{ij}^c \quad (5)$$

本研究では、 ε_{ij}^c は系が巨視的に変形を拘束されていることを仮定し、 $\bar{\varepsilon}_{ij}^c = 0$ で与えられる。一方、変動ひずみ $\delta \varepsilon_{ij}^c$ は平衡方程式 $\sigma_{ij,j} = 0$ をフーリエ変換を用いて解くことで次式のように導かれる³⁾。

$$\delta \varepsilon_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_k \frac{1}{2} (n_i \Omega_{mj} + n_j \Omega_{mi}) n_n \hat{\sigma}_{mn}^0(k) \exp(-ik \cdot \vec{x}) dk \quad (6)$$

また、多結晶体における CT 変態で生じる変態ひずみを塑性変形で緩和すること (塑性緩和) を表現可能にするために、固有ひずみ ε_{ij}^0 を変態ひずみ ε_{ij}^{trans} と塑性ひずみ ε_{ij}^p の和として表現する。

$$\varepsilon_{ij}^0 = \varepsilon_{ij}^{trans} + \varepsilon_{ij}^p = \sum_{n=1}^3 R_{ik} R_{jl} \varepsilon_{kl}^{00}(n) \phi_n + \varepsilon_{ij}^p \quad (7)$$

ここで、変態ひずみ ε_{ij}^{trans} は Cubic-Tetragonal 変態で形成しうるバリエント i ($i = 1, 2, 3$) が形成する際に生じる変態ひずみ $\varepsilon_{ij}^{00}(i)$ の和として定義する。 R_{ij} は回転マトリクスであり、その回転角を母相粒の結晶方位とする。そして、変態に伴う塑性ひずみの発展および空間分布は、次式に示す塑性ひずみの TDGL 方程式により表現する⁴⁾。

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

ここで、 K_{ijkl} は $K_{ijkl} = (KC_{ijkl})^{-1}$ にて与えられる定数、 G_{el}^{shear} はせん断ひずみエネルギーである。以上で求められる全自由エネルギーより、T 相の時間発展を表す秩序変数 ϕ_i の時間発展方程式は、次式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -L \frac{\delta G}{\delta \phi_i} = -L \left(\frac{\partial g_{ch}}{\partial \phi_i} + \frac{\partial g_{el}}{\partial \phi_i} - \kappa \nabla^2 \phi_i \right) \quad (9)$$

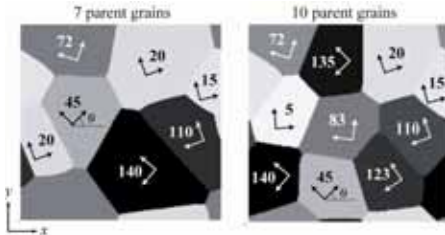


Fig.2 Polycrystalline structures with 7 and 10 parent grains.



Fig.3 Evolution of tetragonal phase without PA in polycrystalline material containing 7 parent grains.

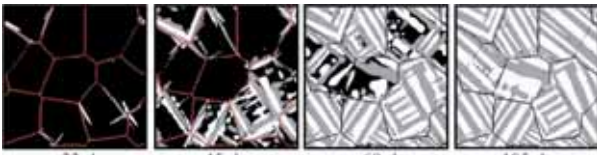


Fig.4 Evolution of tetragonal phase without PA in polycrystalline material containing 10 parent grains.

3 解析モデル

本研究では弾完全塑性体の系を仮定し、2次元多結晶体における Cubic-Tetragonal 変態の数値シミュレーションを行う。このとき、式(9)の時間発展方程式を ϕ_1, ϕ_2 について数値解析する。本研究で用いる解析モデルを図2に示す。解析領域内の母相粒数は7個と10個の2種類を用意し、各粒に結晶方位をランダムに与える。各粒内の数字は結晶方位 θ を表しており、 x 軸と母相の[100]方向とのなす角度として定義する。さらに、粒界に0.01以下の塑性ひずみ ε_{12}^p を分布させて、母相粒界からのT相の形成過程を再現する。系の弾性係数は、 $C_{11} = 140, C_{44} = 28, C_{12} = 84$ [GPa]、塑性変形が生じる系の降伏応力はC相で250 [MPa]、T相で800 [MPa]とする。変態ひずみは、 $\varepsilon_{11}^{00}(1) = \varepsilon_{22}^{00}(2) = -0.1, \varepsilon_{22}^{00}(1) = \varepsilon_{11}^{00}(2) = 0.1$ である。

4 結果と考察

図3と図4に、結晶粒数が7個および10個の系における、塑性緩和を伴わないT相の形成過程を示す。図中、黒色の領域($\phi_i < 0.6$)が母相のC相を表している。また、灰色($\phi_1 > 0.6$)および白色($\phi_2 > 0.6$)の領域はそれぞれc軸が母相の[100]軸、[010]軸と平行なT相を表している。(以後、これらをそれぞれバリエーション1および2と呼ぶ)。どちらの系においても、母相の粒界近傍からT相が成長しているが、母相粒間の弾性相互作用により、変態によって生じた応力場は粒界三重重点において集中し、T相は優先的にそこから形成することがわかる。さらに、粒界近傍でT相が形成された後は、それにより生じた変態応力に誘起されて、先に形成したT相の周囲にバリエーション1とバリエーション2が交互に形成されていくことにより、系全体にT相広がっていくことがわかる。塑性緩和が出来ないこれらの系では、バリエーションの自己調整

(Self-accommodation)機構が働き、変態によって生じる弾性ひずみエネルギーを最小化するように組織が形成される。そして、最終的には形状記憶合金で観察されるようなバリエーション1と2が粒内に交互に並んだ層状組織が粒内に形成される⁵⁾。さらに、母相粒数が7個の系においては、10個の系に比べて母相粒の弾性的拘束が弱いために、特に粒径の大きな母相においてバリエーションの分布が粗くなっていることがわかる。

図5に、母相粒が10個の系における塑性緩和を伴うT相の形成過程を示す。T相の形成過程は、図4や図5に示したものと同様であるが、図6に示すように変態ひずみを緩和するために系全体で塑性変形が生じるこの系では、塑性変形によって大きく弾性ひずみエネルギーが減少する。したがって、弾性ひずみエネルギーを駆動力として作用するバリエーションの自己調節効果が弱まり、系全体がT相に変態したときのバリエーションの分布は、先に示した結果ほど緻密な層状組織が形成されないことがわかる。

以上の結果より、本研究で構築したマルテンサイト変態の弾塑性PFモデルを用いた数値シミュレーションを種々の条件下で行うことで、多結晶体におけるマルテンサイト変態による組織形成過程のみならず、バリエーションの自己調節機構や塑性変形による変態ひずみの緩和が組織形態に及ぼす影響を明らかにすることができる。

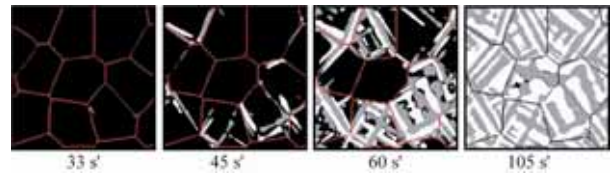


Fig.5 Evolution of tetragonal phase with SA and PA in polycrystalline material containing 10 parent grains.

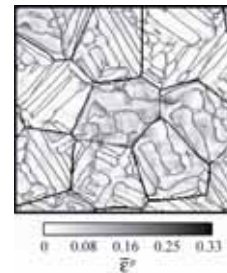


Fig.6 Distribution of equivalent plastic strain in martensitic microstructure in polycrystalline material with 10 parent grain at 105 s'.

参考文献

- 1) A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Mater. Sci. Eng. A, (2008), in press.
- 2) A. G. Khachaturyan, Theory of Structural Transformations in Solids, John Wiley and Sons, NY, (1998).
- 3) T. Koyama and H. Onodera, Mater. Trans., 44, (2003), 2503 - 2518.
- 4) X. H. Guo, S. -Q. Shi and X. Q. Ma, Appl. Phys. Lett, 87, (2005), 221910.
- 5) Y. Aydogdu and O. Adiguzel, J. Mater. Proc. Technol., 123, (2002), 498-500.