

Multi-Phase-Field 法による パーライト変態に及ぼす粒界拡散の影響評価

神戸大学[院] 山本 隆史 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

Evaluation of Effects of Grain Boundary Diffusion on Pearlite Transformation by Multi-Phase-Field Method

Takashi YAMAMOTO, Akinori YAMANAKA, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

フェライト(α)相とセメントライト(θ)相の共析組織であるパーライト組織は、ラメラやコロニー、ブロックなどの特徴的な組織形態を有するが、その形成メカニズムはいまだ明らかにされていない。しかしながら、これまでの研究により、パーライト組織形成は炭素原子の拡散により支配され、特に結晶粒界における炭素拡散が結晶粒内より速いことから、炭素原子の粒界拡散がパーライト組織の形成に大きな影響を与えていることが指摘されている¹⁾。本研究では、まずパーライト組織の形成過程を予測可能とすることを目的とし、Multi-Phase-Field法を用いてFe-C二元合金におけるパーライト変態をモデル化する。そして、粒界拡散がパーライト組織の形成およびその成長速度に及ぼす影響について検討する。さらに、従来報告されているパーライトラメラの成長速度とラメラ間隔の関係性と、本研究で得られた結果との比較を行う。

2 Multi-Phase-Field モデル

N 個の結晶粒を含む系を考え、 i ($i=1, \dots, N$) 番目の結晶粒を粒 i と定義する。秩序変数は、粒 i の存在確率を表すphase field ϕ_i と炭素濃度 C を定義する。 ϕ_i は粒 i 内では1、他の粒内で0の値をとる変数であり、 ϕ_i が0から1に滑らかに変化する領域を界面として定義する。さらにphase field ϕ_i は次式を満たす。

$$\sum_{i=1}^N \phi_i = 1 \quad (1)$$

また、炭素濃度 C は各結晶粒における炭素濃度 C_i のphase field ϕ_i による重み付け和として、次式のように定義される。

$$C = \sum_{i=1}^N \phi_i C_i = \phi_1 C_1 + \phi_2 C_2 + \phi_3 C_3 + \dots + \phi_N C_N \quad (2)$$

系の全自由エネルギーは、次式に示すGinzburg-Landau型のGibbsの自由エネルギー汎関数を用いて定義する²⁾。

$$G = \int_V \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + W_{ij} \phi_i \phi_j \right) + g_e \right] dV \quad (3)$$

全自由エネルギーが時間とともに単調減少し、組織形成が進行すると仮定すると、phase field ϕ_i の時間発展方程式は、次式のTDGL方程式で表される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\sum_{j=1}^N \frac{M_{ij}^{\phi}}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (4)$$

ここで、 ΔE_{ij} は、相変態に伴う化学的自由エネルギーの変化量を表しており、例えば粒 i 、粒 j がそれぞれ γ 相、 α 相の場合であれば、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の化学的自由エネルギー変化量を表す。本研究では、 ΔE_{ij} は変態エントロピーと過冷度の積として定義し、次式で表す。

$$\Delta E_{ij}(C, T) = \Delta S_{ij} \cdot \Delta T_{ij}(C, T) \quad (5)$$

ここで、変態エントロピー ΔS_{ij} は相により値が決まり、過冷度 ΔT_{ij} は線形化平衡状態図より求められる炭素濃度 C と系の温度 T から算出される。

さらに、本モデルでは、炭素原子の拡散流束 J が各粒からの拡散流束 J_i のphase field ϕ_i による重み付け和として表現されると仮定し、次式の拡散方程式を導出する³⁾。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot J = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i J_i \right) \quad (6)$$

各粒内における拡散係数を D_i とすると、拡散流束 J_i は $J_i = D_i \nabla C_i$ と表すことができるため、式(6)は次式のように表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i D_i \nabla C_i \right) \quad (7)$$

3 解析モデル

共析鋼 (Fe-0.77wt% C) の970K等温保持におけるパーライト組織の成長シミュレーションを行う。本研究で用いる解析モデルを図1に示す。解析領域下部にラメラ間隔 λ の初期ラメラ組織を配置し、残りの部分をオーステナイト(γ)相とする。図1は $\lambda = 0.24 \mu\text{m}$ の場合に対応しており、特に述べない限りこの値を用いる。差分格子

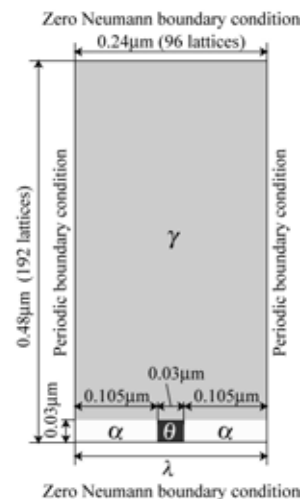


Fig. 1 Simulation model.

は 96×192 の規則格子を用い、差分格子間隔は $\Delta x = \Delta y = 2.5 \text{ nm}$ とする。各相の初期の炭素濃度は、 α 相と θ 相では共析温度 1000K における平衡組成、 γ 相ではFe-C系共析鋼の炭素濃度と等しい $0.77\text{wt}\%$ とする。境界条件は、左右端面では周期境界条件、上下端面では零ノイマン境界条件を用いる。さらに、粒界拡散は、 $0 < \phi_i < 1$ の領域として定義される界面領域において拡散係数を定数 k 倍することによって表現する。

4 解析結果と考察

図2に粒界拡散を考慮しない場合($k = 1$)のパーライトラメラ形成過程を炭素濃度分布の変化で示す。このとき、 α 相が θ 相の前にせり出すように成長し、 α 相と θ 相の協調的な成長が実現されていないことが分かる。図3に、等温保持開始後 0.15 s における $k = 1, 2, 4, 8$ それぞれの場合のパーライト組織形態を炭素濃度分布で示す。粒界拡散を考慮しない場合($k = 1$)に対し、粒界拡散を導入した場合($k = 2, 4, 8$)には α 相と θ 相が協調的に成長し、ラメラが成長していることが分かる。さらに、粒界における拡散が速くなるほどラメラが速く成長していることが分かる。これは、界面領域、特に γ/α 界面での炭素原子の拡散が速くなったことで、 α 相から排出された炭素原子が θ 相へ拡散され易くなり、濃度分配が十分に行われるようになったためである。パーライトラメラの成長には粒界拡散が重要な役割を果たしていることが本解析からも示唆される。

次に、パーライトラメラの成長速度 V とラメラ間隔 λ の関係について、従来の理論⁴⁾との比較を行う。図4に、本解析で得られた V と λ の関係を示す。ラメラ間隔 λ が減少するほどラメラの成長速度 V が増加しており、 λ と V の関係としては妥当な傾向を示しているといえる。また、 V と λ は $V\lambda^n = \text{constant}$ の関係を満たすことが知られており、本解析における $k = 1, 2, 4$ の場合の結果に関しても、 V と λ の関係式を次式のようにまとめることができる。

$$k=1: V\lambda^{1.2} = \text{constant} \quad (8)$$

$$k=2: V\lambda^{1.3} = \text{constant} \quad (9)$$

$$k=4: V\lambda^{1.4} = \text{constant} \quad (10)$$

文献(4)によれば、パーライトラメラの成長が母相中の炭素原子拡散に律速されるとした場合(体拡散律速説)と、相界面での炭素原子拡散に律速されるとした場合(界面拡散律速説)それぞれについて、パーライトラメラの成長速度 V とラメラ間隔 λ の関係式は次式のように表される。

$$\text{体拡散律速: } V\lambda^2 = \text{constant} \quad (11)$$

$$\text{界面拡散律速: } V\lambda^3 = \text{constant} \quad (12)$$

ここで、今回の解析で得られたようなパーライトラメラの成長速度においては体拡散律速とした場合の式(11)が実験値と良く合うとされる⁴⁾。解析結果と式(11)を比較すると、現時点では定数 n の値は理論値($n = 2$)より小さく、これについては界面のモビリティや粒界拡散の大きさについて更なる検討が必要である。しかしながら、定数

k の値が大きくなると n の値が理論値に近づくことが分かる。このことから、実際のパーライト変態においては本解析で考慮したよりも大きな粒界拡散が寄与していることが示唆される。

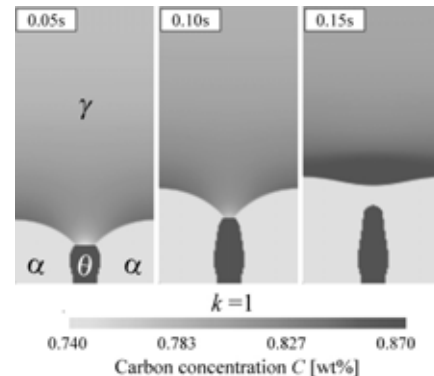


Fig. 2 Distributions of carbon concentration during growth of pearlite lamellar without grain boundary diffusion ($k = 1$).

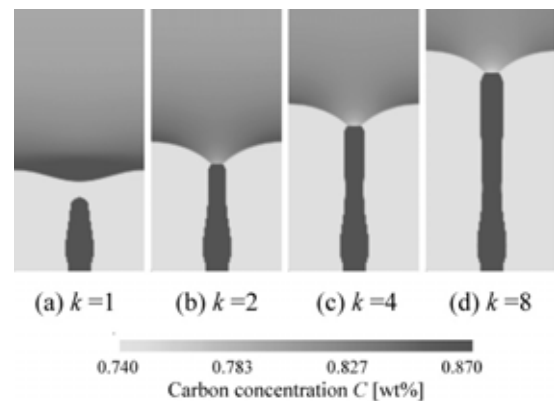


Fig. 3 Distributions of carbon concentration at 0.15 s for (a) $k = 1$, (b) $k = 2$, (c) $k = 3$ and (d) $k = 4$.

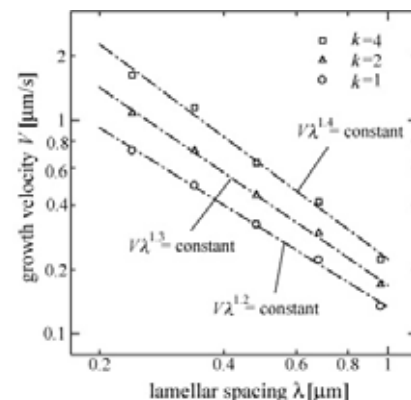


Fig. 4 Relationships between growth velocity V and lamellar spacing λ for $k = 1, 2, 4$.

参考文献

- 1) 榎本正人, 金属の相変態, 内田老鶴圃 (2000), 204.
- 2) I. Steinbach and F. Pezzolla, Physica D, 134, (1999), 385-393.
- 3) K. Nakajima, M. Apel and I. Steinbach, Acta Materialia, 54, (2006), 3665-3672.
- 4) N. Ridley, Metallurgical Transactions A, Vol.15A (1984), 1019-1036.