



Phase-Field法による鉄鋼材料の組織形成予測および力学特性評価に関する研究

山中, 晃徳

(Degree)

博士 (工学)

(Date of Degree)

2008-09-25

(Date of Publication)

2009-06-26

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲4416

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1004416>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



博士論文

Phase-Field法による鉄鋼材料の 組織形成予測および力学特性評価 に関する研究

平成20年7月

神戸大学大学院自然科学研究科

山中 晃 徳

目次

第1章 緒論	1
1.1 研究の背景と目的	1
1.2 本論文の構成	5
第2章 基礎理論	8
2.1 Phase-Field 法の基本概念	8
2.2 副格子モデルに基づく Phase-Field 法を用いた拡散変態モデル	13
2.2.1 秩序変数と全自由エネルギー	13
2.2.2 時間発展方程式	16
2.2.3 界面異方性	18
2.2.4 時間発展方程式の離散化手法	21
2.3 Multi-Phase-Field 法を用いた拡散変態モデル	29
2.3.1 秩序変数と全自由エネルギー	29
2.3.2 時間発展方程式	30
2.3.3 線形化平衡状態図	34
2.4 Micromechanics 理論に基づく Phase-Field 法を用いた無拡散変態モデル	38
2.4.1 秩序変数と全自由エネルギー	38
2.4.2 時間発展方程式	42
2.5 均質化法に基づく弾塑性有限要素法による力学特性評価手法	44
2.5.1 弾塑性体の構成式と漸近展開理論に基づく均質化法	44
2.5.2 有限要素方程式	49
第3章 Fe-C 合金におけるフェライト変態挙動と組織形態変化	53
3.1 緒言	53
3.2 解析モデルおよび解析条件	54
3.3 Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態と炭素拡散挙動	57
3.3.1 フェライト相の成長と炭素拡散挙動の温度依存性	57
3.3.2 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態機構の初期炭素濃度依存性	59

ii 目次

3.4	$\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による Widmanstätten フェライトの形成	62
3.4.1	単一の Widmanstätten フェライト形成過程に及ぼす界面異方性の影響	62
3.4.2	Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトへの組織形態変化	67
3.5	結言	70
第4章	多結晶 γ 相におけるフェライト粒成長シミュレーション	72
4.1	緒言	72
4.2	相および結晶方位差に依存した界面特性のモデル化	73
4.3	解析モデルと解析条件	75
4.4	フェライト変態によるフェライト粒成長と組織形態変化	77
4.4.1	冷却速度が変態率およびフェライト粒形態に及ぼす影響	77
4.4.2	フェライト粒形態に及ぼす界面エネルギーの影響	79
4.4.3	フェライト粒形態に及ぼす界面モビリティの影響	81
4.5	結言	82
第5章	炭素鋼におけるパーライト組織形成過程の数値シミュレーション	83
5.1	緒言	83
5.2	解析モデルおよび解析条件	84
5.3	パーライト変態によるラメラ組織形成過程	88
5.3.1	パーライトラメラ成長のラメラ間隔依存性	88
5.3.2	パーライト組織形成に及ぼす粒界拡散の影響	90
5.3.3	γ 相中の炭素濃度分布がパーライト組織形態に及ぼす影響	93
5.4	結言	94
第6章	塑性緩和を伴うマルテンサイト変態による組織形成過程	96
6.1	緒言	96
6.2	解析モデルおよび解析条件	98
6.3	単結晶母相におけるマルテンサイト変態挙動	100
6.3.1	マルテンサイト相の成長過程における塑性緩和挙動	100
6.3.2	マルテンサイト組織形成過程に及ぼす自己緩和と塑性緩和の影響	103
6.4	多結晶母相におけるマルテンサイト変態挙動	105

6.4.1	母相粒間の弾性相互作用ならびに応力緩和挙動の影響評価	105
6.4.2	母相およびマルテンサイト相の降伏応力の影響	108
6.5	結言	109
第7章	拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程のモデル化	111
7.1	緒言	111
7.2	競合変態の Phase-Field モデル	112
7.3	解析モデルと解析条件	113
7.4	競合変態による組織形成過程の濃度依存性	115
7.5	結言	118
第8章	フェライト-パーライト鋼の材質予測シミュレーション	120
8.1	緒言	120
8.2	解析モデルおよび解析条件	121
8.3	γ 粒内のフェライト相形成予測	123
8.4	代表体積要素の作成手法	125
8.5	フェライト-パーライト鋼の力学特性評価	127
8.5.1	フェライト-パーライト鋼の巨視的変形挙動に及ぼすフェライト 相の影響	127
8.5.2	微視組織内部の変形挙動に及ぼすフェライト相形態の影響	128
8.6	結言	131
第9章	結論	133
	参考文献	137
付録A	Ginzburg-Landau 型自由エネルギー汎関数の導出	156
付録B	Sharp interface limit による各種パラメータの導出	158
付録C	Fe-C 合金の化学的自由エネルギーの熱力学パラメータ	161
付録D	Solute Drag 効果を考慮した界面モビリティの導出	163
付録E	Multi-Phase-Field 法におけるパラメータの導出	166

iv 目次

付録F アダプティブ法による数値解析の効率化	169
付録G 関連学術論文・学術講演	172
謝辞	180

第1章

緒論

1.1 研究の背景と目的

鉄鋼材料の組織制御と材質予測

鉄鋼材料の主成分である Fe は, Si, Al に次いで多く地球の地殻中に含まれる金属元素であり, その酸化物である鉄鉱石を還元して金属 Fe を取り出すことが比較的容易であるため, 鉄系材料は有史以前から人類が使用している代表的な金属材料である⁽¹⁾. さらに, Al 合金や Mg 合金など様々な金属材料が開発された現代でも, 鉄鋼材料が我々の社会を支える基盤材料である最大の理由は, 材料の化学組成や熱処理条件を変化させることによって生じる多様な相変態や析出を利用して組織制御し, 強度と延性のバランスに優れた力学特性を発現させることが可能であるためである⁽²⁾. また, 同じ材料内であっても部位によって内部組織を変化させることで傾斜機能を付与することもできる. 例えば, 日本の伝統工芸である日本刀においては, 刃先にはマルテンサイト相, 刀身にはパーライト組織を内部組織とすることで, 刀に優れた強度と靱性を兼ね備えさせている^(3, 4). このように, 金属学や冶金学に関する知識が十分に蓄積されていなかった時代から, 人々は経験に基づいて鉄鋼材料の材質制御を行ってきたといえる.

その後, 金属組織の測定技術, 解析技術が発達するにつれて, 鉄鋼材料における微視組織の結晶学的特徴や相変態機構および組織と力学的性質との関係が明らかにされ, 現在までに金属学に基づいた材料設計によって, 実に様々な種類の鉄鋼材料が開発されてきた. しかしながら, 用途に合わせて要求される性質をもつ鉄鋼材料を創製するために, 製造プロセスの複雑化や合金元素の増加が生じ, 従来の知識や経験のみでは内部組織の発展や力学特性の予測が困難になってきている⁽⁵⁾. このように材質予測が難しく

なると、実際の製造工程で製造される材料の性質にばらつきが生じるのみならず、既存材料の高機能化や新規材料の開発にかかるコストが増加するなどの問題が生じる⁽⁶⁾。このため、実験的手法に加えてコンピューターシミュレーションを援用した材質予測、すなわち各工程で形成される内部組織の形成予測と組織形態を陽に考慮した材料の力学特性評価を系統的に実施可能にすることが、上記問題の解決策として期待されてきた^(7, 8, 9, 10)。さらに今後も、省エネルギー材料としての期待の高まりや産業の発展に伴って、より高機能な鉄鋼材料の開発が求められると予想される。このような背景のもと、上記のような計算材料科学を用いた材質予測手法を確立することは、先に述べた開発コストの削減のみならず、これまで明らかにされていない組織形成過程の理解や新たな力学特性の発現メカニズムの発見に有益な情報を提供し、新規材料の開発に大きく貢献すると考えられる。

本研究は、このような数値シミュレーションを援用した鉄鋼材料の材質予測技術の確立を目指すものであり、以下では数値シミュレーションによる鉄鋼材料における内部組織形成予測および組織形態に基づいた力学特性評価手法について概説した後、本論文の目的を述べる。

鉄鋼材料における内部組織形成とその予測手法

鉄鋼材料の内部組織は極めて多種多様であるが、実際の製造工程における組織形成を数値シミュレーションで系統的に予測するとすれば、予測すべき組織形成過程は次のようにまとめられる。すなわち、溶融鉄の冷却工程における凝固組織形成、熱間・冷間加工工程における動的・静的再結晶によるオーステナイト粒構造の形成、そして冷却工程における相変態や析出による変態生成組織の形成過程である⁽¹¹⁾。このうち、最終製品の内部組織を構成し、力学特性を最も大きく特徴づけているのは変態生成物の空間分布や組織形態であり、これらを精度良く予測することが重要である。

鉄鋼材料における相変態は、原子の長距離拡散によって変態が進行する拡散変態と原子の拡散は伴わず原子の集団的な移動によって進行する無拡散変態に大別できる⁽¹²⁾。比較的高温側で発生するフェライト変態やパーライト変態においては前者が、低温側で生じるマルテンサイト変態においては後者が主要な変態機構であり、その中間温度域では両方の変態機構が作用してベイナイト変態が生じる^(13, 14, 15)。これらの相変態によって形成されるフェライト、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトは鉄鋼材料の内部組織を構成する単一組織であり、実用鋼における組織形成予測を行うために

は、これら単一組織および単一組織からなる複合組織形成を再現可能な組織形成シミュレーション手法を構築する必要がある。

以上で述べたような相変態現象や鉄鋼材料における組織形成過程を予測するための組織形成シミュレーション手法^(16, 17)として、モンテカルロ (MC) 法^(18, 19, 20) やセルラーオートマトン (CA) 法^(21, 22) に代表される確率論的手法がある。Zhang らや Tong らは、これら手法を用いて連続冷却過程における冷却速度に依存したフェライト変態およびフェライト粒成長挙動を再現可能にしている^(23, 24)。さらに、Xiao らや Lan らは結晶塑性有限要素法と MC 法および CA 法とを組み合わせることで、変態前のオーステナイト母相の変形状態がフェライト粒の成長に及ぼす影響を明らかにしている^(25, 26, 27)。しかしながら、MC 法は実時間との対応付けが難しく、CA 法は界面エネルギーの影響を考慮できないなどの問題がある。

これに対し、1993 年に小林が過冷却融液からのデンドライト成長をはじめて再現して以来、ナノ・メソスケールにおける強力な組織形成シミュレーション手法として注目されているのが、現象論的連続体モデルの Phase-Field 法である^(28, 29, 30, 31, 32, 33)。Phase-Field 法の枠組みや基本概念は次章にて詳細に説明するが、Phase-Field 法は全自由エネルギーの最小化原理に基づき、速度論的、エネルギー論的に組織形成過程を定量的に記述できる点で他の手法よりも優位性がある⁽³⁴⁾。さらに、全自由エネルギーは化学的自由エネルギー、弾性ひずみエネルギーおよび界面エネルギーなどの各エネルギーの和として評価するので、関係するエネルギー量を評価できれば、どのような組織形成過程に対しても同じ枠組みでモデル化することができ、多くの材料における組織形成過程を再現可能である。実際に、Phase-Field 法は凝固組織形成のシミュレーション手法^(35, 36, 37, 38, 39, 40)として発展し、現在では、鉄鋼材料を含めて多種多様な合金、高分子材料における凝固^(41, 42)、再結晶粒成長^(43, 44, 45)、拡散相分離^(46, 47)、結晶変態^(48, 49)さらにクラックや転位のダイナミクス^(50, 51, 52)にまで適用範囲が拡大され、その有効性が示されてきている。

本研究では、このような広範な適用性を有する Phase-Field 法を用いて鉄鋼材料における種々の組織形成過程を予測可能とするために、拡散変態であるフェライト変態およびパーライト変態、さらには無拡散変態であるマルテンサイト変態を表現する Phase-Field モデルを構築し、各単一組織の組織形成シミュレーションを可能にする。さらに、複相組織形成過程やベイナイト変態のような中間変態を再現可能することを目的として、拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程を表現可能な統一的 Phase-Field

モデルの構築を試みる。

微視組織を考慮した力学特性評価手法

Phase-Field 法に基づく組織形成シミュレーションで得られた解析結果, すなわち組織の成長速度, 各相の体積分率の時間変化, 組織分布およびその形態などは, 様々な方法で力学特性評価に利用することができる。たとえば, 相変態によって形成される組織の体積分率の時間変化を Johnson-Mehr 型の発展式⁽⁵³⁾ で表現し, 内部状態変数として構成式に導入して有限要素法による力学特性評価⁽⁵⁴⁾ を行うのであれば, 組織形成シミュレーションで得られる各相の体積分率の時間変化を直接入力データとして利用することができる。また, 組織形成シミュレーションを計算機実験とみなして組織の発展式のパラメータを同定することも可能である。しかしながら, 鉄鋼材料においては, 構成相の体積分率が同じであっても組織形態が異なれば材料の変形挙動が異なることもあり, 内部組織の影響を体積分率という巨視的に平均化した状態量として考慮するのみでは十分にその材料の変形挙動を予測することができないことも考えられる。さらには, 数値シミュレーションによる材質予測手法によって最終製品の特性を予測可能とするのみならず, 所望の力学特性を発現させる組織形態がどのようなものであるか探索可能とすることも, 材料開発には大きなメリットとなる。したがって, Phase-Field 法による組織形成シミュレーションの解析結果として, 組織の分布や形態を画像データとして出力することも可能であることから, その組織形態データを力学特性評価の入力情報として直接利用することが最も効果的な方法であると考えられる。

上記のような材料内部の微視構造を陽に考慮した力学特性評価が可能な手法としては, 等価介在物理論やマイクロメカニクス理論^(55, 56, 57), それを発展させたセルフコンシステント法⁽⁵⁸⁾ や Secant 法⁽⁵⁹⁾ などがある。友田らは Secant 法と Swift 型の構成式を用いてフェライト, ベイナイト, マルテンサイトからなる 3 相組織鋼の応力ひずみ曲線を予測可能としている^(60, 61)。しかしながら, これらの等価介在物理論やマイクロメカニクス理論に基礎を置く変形挙動解析法では, 特別な数値演算処理を行わない場合, 円形, 楕円形や長方形など簡単な形態の介在物 (第 2 相) を含む系の解析に限定され, 鉄鋼材料内部の微視組織のような複雑な微視構造を持つ系のミクロな変形挙動や応力ひずみ分布を詳細に調査することは難しい。したがって, これらの理論とは異なる方法を用いて, 組織形成シミュレーションで得られる複雑な内部組構造を反映させた変形挙動解析を行い, ミクロ・マクロ両スケールにおける力学特性評価を合理的に行うことが望

まれる。

これに対して、微視構造を考慮した変形挙動を表現する新たな手法として、Guedesらは均質化法に基づく有限要素法を提案した⁽⁶²⁾。均質化法を用いることで、材料内部の複雑な任意形状の組織を有限要素モデル(代表体積要素)として表現できるうえ、巨視的変形挙動と微視的変形挙動を表す2変数を定義し、それぞれの変数の支配方程式を解くことで、数学的に整合性を保ちながら、組織が分布しているミクロ領域とマクロ領域における材料の変形挙動を同時に表現することが可能である⁽⁶³⁾。したがって、これまでに弾性問題の解析^(64, 65)が行われた後、時間非依存^(66, 67, 68, 69, 70)および時間依存⁽⁷¹⁾の弾塑性変形解析等が報告され、微視構造を有する材料の変形挙動解析手法として確立されてきている。そして、比嘉らはこれらを更に発展させ、高次のひずみ勾配項を導入したひずみ速度依存形の弾塑性構成式を用いて、均質化法に基づく有限要素解析を行い、粒子強化型複合材料の特徴長さに依存した変形応答を表現可能とした⁽⁷²⁾。さらに、松井らは均質化法に基づく弾塑性有限要素法を用いて、フェライト-パーライト鋼の引張り変形解析を行い、パーライト組織中のセメンタイト形態がマクロな応力ひずみ曲線や組織内部のひずみ分布に与える影響を明らかにできることを示しており、バウシinger効果の発現メカニズムを明らかにするなど、均質化法の有用性を示している^(73, 74)。ただし、これらの解析では微視組織の形態は実際の組織写真を参考にして理想化したものであり、詳細な組織の形成過程については考慮されていない。

そこで本研究では、先に述べたようにPhase-Field法を用いて鉄鋼材料における各種組織形成予測を行い、組織形成シミュレーションで得られた組織形態データをもとに代表体積要素を作成することで、均質化法に基づく有限要素解析を実施可能とする。そして、これらのプロセスから構成される一連の材質予測シミュレーション手法を構築する。

1.2 本論文の構成

本研究は、数値シミュレーションによる鉄鋼材料の材質予測技術の確立を目指すものであり、本論文においては、鉄鋼材料の材質予測の根幹をなし、最も重要となるフェライト、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトなどの各単一組織の形成予測および鉄鋼材料の力学特性評価を一貫して実施可能とする、材質予測シミュレーション法を構築することを目的としている。以下に、本論文の構成と各章の概要を示す。

第2章の基礎理論では、はじめに Phase-Field 法の基本概念について述べた後、Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーション法を説明する。ついで、鉄鋼材料におけるフェライト変態、パーライト変態などの拡散変態を表現する Phase-Field モデルの導出および、無拡散変態であるマルテンサイト変態による各種組織形成過程を表現する新たな Phase-Field モデルの構築を行う。さらに、組織形成シミュレーションで予測される微視組織を内部に有する、鉄鋼材料の力学特性評価を行うための2変数漸近展開理論に基づく均質化法、および弾塑性有限要素法について述べる。

第3章では、副格子モデルに基づく Phase-Field 法を用いて、Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行う。ここでは、はじめに一次元空間において $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行い、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態機構および α 相形成に伴う炭素拡散挙動の温度、初期炭素濃度依存性について詳細に検討する。ついで、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により形成される Widmanstätten フェライトの形成シミュレーションを行い、Widmanstätten フェライトの形成過程やその形態に及ぼす界面異方性の影響を検討するとともに、Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトへの形態変化メカニズムを明らかにする。

第4章では、多結晶 γ 相における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態や $\alpha + \gamma$ 2 相組織の形成を予測可能とするために、Multi-Phase-Field 法を用いて、Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における α 粒成長挙動を再現する。そして、 α 相の体積分率の変化や $\alpha + \gamma$ 2 相組織形態に及ぼす、冷却速度の影響を検討する。さらに、相や方位差に依存した界面エネルギーおよび界面モビリティをモデル化し、Phase-Field モデルに導入する。そして、それらが $\alpha + \gamma$ 2 相組織形成過程に及ぼす影響を明らかにする。

第5章では、鉄鋼材料の冷却工程における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態後のパーライト変態を予測可能とするために、Multi-Phase-Field 法を用いて Fe-C-Mn 合金におけるパーライト組織形成過程の数値シミュレーションを行う。また、粒界拡散を Phase-Field モデルにおいて表現し、ラメラ間隔や粒界拡散がパーライト組織形態やその成長速度に及ぼす影響を明らかにする。さらには γ 相における炭素濃度の不均一性に依存した、パーライト組織形成過程を再現可能であることを示す。

第6章では、高強度鋼の強化相として重要なマルテンサイト組織の形成過程を予測可能とするために、第2章で構築する変態ひずみの自己緩和および塑性緩和が生じるマルテンサイト変態を表現する Phase-Field モデルを用いて、立方晶から正方晶へのマルテンサイト変態の数値シミュレーションを実施する。そして、単結晶母相および多結晶母相におけるマルテンサイト相の成長過程を再現し、自己緩和と塑性緩和の両ひずみ緩

和挙動がマルテンサイト組織形成過程に及ぼす影響を明らかにする。

第7章では、鉄鋼材料におけるベイナイト変態に見られるような拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程を数値シミュレーションで再現可能とするために、拡散変態と無拡散変態を統一的に取り扱うことが可能な Phase-Field モデルを提案する。そして、2元合金の等温保持において、母相のスピンーダル分解とマルテンサイト変態による新相形成が同時に生じる、競合変態の数値シミュレーションを行い、初期濃度に依存した変態挙動や組織形成過程について検討する。

第8章では、第3章から第7章までに示す Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで得られる組織形態に基づき、鉄鋼材料の力学特性を評価可能とする一連の材質予測シミュレーション手法を提案する。ここでは、実際に第3章で示す Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションで予測される α 相を含む、フェライト-パーライト 2相鋼の材質予測シミュレーションを行い、微視組織形態に依存したフェライト-パーライト鋼の力学特性を明らかにする。そして、本研究で提案する Phase-Field 法と均質化法を用いた一連の材質予測シミュレーション法の可能性やその有効性を示す。

最後に、第9章の結論においては、本研究の総括を述べる。

第2章

基礎理論

本章では、はじめに Phase-Field 法の基礎となる Diffuse interface モデルの概念と Cahn-Hilliard モデルおよび Allen-Cahn モデルについて概説する。そして、Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションの解析方法を実際の解析手順に沿って提示し、Phase-Field 法の広範な適用性について述べる。ついで、鉄鋼材料におけるフェライト変態、パーライト変態に代表される拡散変態の Phase-Field モデルを導出し、無拡散変態であるマルテンサイト変態による組織形成過程を表現する Phase-Field モデルを構築する。さらに、Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで予測される微視組織を内部に有する鉄鋼材料の力学特性評価を行うために用いる、2変数漸近展開理論に基づく均質化法について述べ、有限要素方程式を導出する。

2.1 Phase-Field 法の基本概念

Diffuse interface モデルと Phase-Field 法

凝固現象における固液界面や相変態現象における異相界面においては、界面を隔てて濃度、温度および結晶構造などが変化しており、組織は、このような界面が移動することで形成される。したがって、本研究で対象としている相変態や析出による組織形成過程をモデル化し、数値シミュレーションで再現するためには、各組織の成長による界面の移動と、それに伴う温度・濃度変化や結晶構造変化を如何に正確に表現するかが問題となる。

従来より、このような組織形成過程のモデル化手法は界面の取り扱い方で大別され、代表的なものに Sharp interface モデルもしくは Diffuse interface モデルに基づく手法

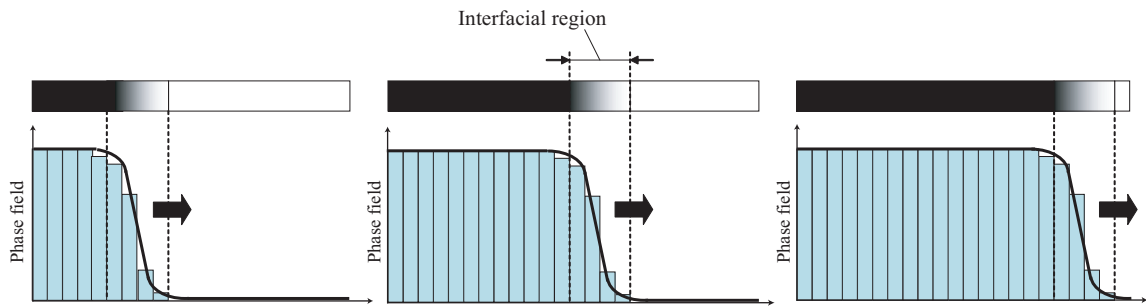


Fig.2.1 Diffuse interface description of moving interface.

がある。Sharp interface モデルは、界面を厚みが無限小の領域として捉え、そこで濃度や結晶構造がステップ関数状 (sharp) に変化すると考えるものである。このモデルに基づく組織形成シミュレーションにおいては、界面の位置は拡散方程式などの支配方程式を解く際の境界条件として取り扱われる。実際に、この手法を用いてフェライト変態に伴うフェライト/オーステナイト界面移動とその界面近傍での炭素拡散挙動が再現されている^(75, 76)。また、フェライト相の成長に及ぼす Solute drag 効果や Solute trapping 効果の影響など、相変態における重要な現象の解析手法として広く用いられてきた^(77, 78)。しかしながら、Sharp interface モデルを用いた数値シミュレーションにより組織形成や組織形態変化を再現するためには、時間の経過に伴って刻々と変化する界面位置を逐次追跡しなければならず、二次元や三次元空間に拡張すると数値計算が煩雑となり限界がある。

一方、界面を有限の幅をもつ領域として考える、Diffuse interface モデル⁽⁷⁹⁾では、例えば濃度や規則-不規則変態における規則度などの組織形成を記述する状態変数を秩序変数 (phase field) として定義し、それらが界面領域において連続的に変化することを仮定する。これにより、図 2.1 に示すように、界面移動や濃度変化を秩序変数の各点での変化として表現することができ、Sharp interface モデルに基づく組織形成シミュレーションを困難にしていた界面位置の逐次追跡が不要となり、多次元空間における数値シミュレーションが容易となる。

このような Diffuse interface モデルの概念は、van der Waals の気液界面の取り扱い⁽⁸⁰⁾に端を発しているが、組織形成過程のシミュレーション手法としての系統的な研究は、1950 年代から 1960 年代にかけての Cahn と Hilliard らの研究が代表的である。彼らは、濃度を秩序変数として、不均一系の全自由エネルギーを表す自由エネルギー汎関数を定式化し、それを質量保存式と Onsager の線形熱力学に基づく拡散流束⁽⁸¹⁾より導か

れる拡散方程式に代入することで, Cahn-Hilliard 非線形拡散方程式を導出した. さらに, それをスピノーダル分解における核形成・成長過程の数値シミュレーションに適用した^(82, 83, 84). 一方, 秩序変数が濃度のような保存量ではなく, 規則度などの非保存量の場合には, Langevin 方程式に自由エネルギー汎関数を代入して得られる Allen-Cahn 方程式 (時間依存型 Ginzburg-Landau 方程式, TDGL 方程式) を用いることで組織形成を再現することができる⁽⁸⁵⁾.

本研究で組織形成シミュレーション手法として用いる Phase-Field 法は, これらの Cahn-Hilliard 方程式および Allen-Cahn 方程式を用いた解析手法と形式的に等しい. すなわち, Phase-Field 法は, 系の全自由エネルギーに基づき秩序変数の時間発展方程式を導出し, それらを数値解析することで, 組織形成過程に伴う界面移動や溶質拡散現象を場の発展として記述可能な方法といえる.

次節では, 実際の解析手順に沿って Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーション手法を説明し, Phase-Field 法の一般性や広範な適用性について述べる.

Phase-Field 法による組織形成シミュレーション

図 2.2 に, Phase-Field 法による組織形成シミュレーションを行うためのフローチャートを示す⁽³³⁾. 以下では, 図 2.2 に示したように (1) ~ (4) の 4 つのプロセスに沿って説明する.

(1) 対象とする組織形成過程を記述する秩序変数 (phase field) を選定する. このとき, 秩序変数は保存量と非保存量があり, どのような物理量を秩序変数として定義するかは自由であるが, モデル化を行う組織形成過程を必要十分に表現しうる秩序変数を選ぶ必要がある. 一般に相変態や析出による組織形成過程をモデル化する場合, 保存量の秩序変数には濃度や温度, 非保存量の秩序変数には結晶方位, 規則度およびひずみとすることが多い. ここでは, 説明を簡便にするために, 保存量の秩序変数として濃度 c , 非保存量の秩序変数として相変態で形成される新相と母相を区別する phase field ϕ を例に説明する.

(2) 系の全自由エネルギーを Cahn と Hilliard の不均一系の自由エネルギー汎関数の形式で定義する. 一般に, 組織形成過程において界面領域では, 結晶構造の乱れや濃度勾配が存在する. このような濃度や結晶構造の不均一性を有する系では, 界面が存在しない状態の自由エネルギー G_{bulk} よりも過剰なエネルギー G_{int} が付加されていると考えられる. Phase-Field 法では, G_{int} を界面エネルギーに関係づけられる勾配エネル

ギーとして表現する。したがって、系全体の自由エネルギー G_{total} は、次式の自由エネルギー汎関数で与えられる⁽⁸²⁾。(詳細な導出過程は、付録 A を参照)

$$G_{total} = G_{bulk} + G_{int} = \int_V \left(g(c, \phi) + \frac{\kappa_c}{2} |\nabla c|^2 + \frac{\kappa_\phi}{2} |\nabla \phi|^2 \right) dV \quad (2.1)$$

ここで、 κ_c および κ_ϕ は、それぞれ秩序変数 c および ϕ の勾配エネルギー係数である。 $g(c, \phi)$ は界面が存在しない系の自由エネルギー密度であり、秩序変数 c と ϕ の関数として定義される。さらに $g(c, \phi)$ は次式に示すように、化学的自由エネルギー密度 g_{chem} 、弾性ひずみエネルギー密度 g_{elast} 、さらには解析対象に応じて電磁気エネルギー密度 g_{elmag} の和として表される。

$$g(c, \phi) = g_{chem}(c, \phi) + g_{elast}(c, \phi) + g_{elmag}(c, \phi) \quad (2.2)$$

式 (2.2) のエネルギー量は様々な方法で評価することができるが、対象としている現象や要求される解析精度と計算負荷との両立を考慮して決定する。例えば、化学的自由エネルギーは CALPHAD 法で求められる自由エネルギー関数を利用する方法⁽⁸⁶⁾ や、秩序変数の Landau 多項展開式を用いて評価する方法⁽⁸⁷⁾ がある。さらに、弾性ひずみエネルギーは有限要素法や Micromechanics 理論^(56, 88) を用いて評価することができる。これら各エネルギーの評価方法は、次節以降にて詳細に説明する。

(3) 系の全自由エネルギーを次式に示す保存量および非保存量の秩序変数 c と ϕ の時間発展方程式⁽¹⁷⁾ :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_c(c, \phi) \nabla \left(\frac{\delta G}{\delta c} \right) \right\} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi(c, \phi) \left(\frac{\delta G}{\delta \phi} \right) \quad (2.4)$$

に代入して、組織形成過程を表現する支配方程式を導出する。実際に、式 (2.3) と (2.4) に式 (2.1) の全自由エネルギーを代入すれば、それぞれ先に述べた Cahn-Hilliard 方程式⁽⁸²⁾、Allen-Cahn 方程式⁽⁸⁵⁾ に等しくなり、勾配エネルギーの等方性を仮定した場合、それぞれ次式で表される。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_c(c, \phi) \nabla \left(\frac{\partial g}{\partial c} - \kappa_c \nabla^2 c \right) \right\} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi(c, \phi) \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} - \kappa_\phi \nabla^2 \phi \right) \quad (2.6)$$

ここで、 M_c および M_ϕ は、 c と ϕ の易動度 (モビリティ) である。

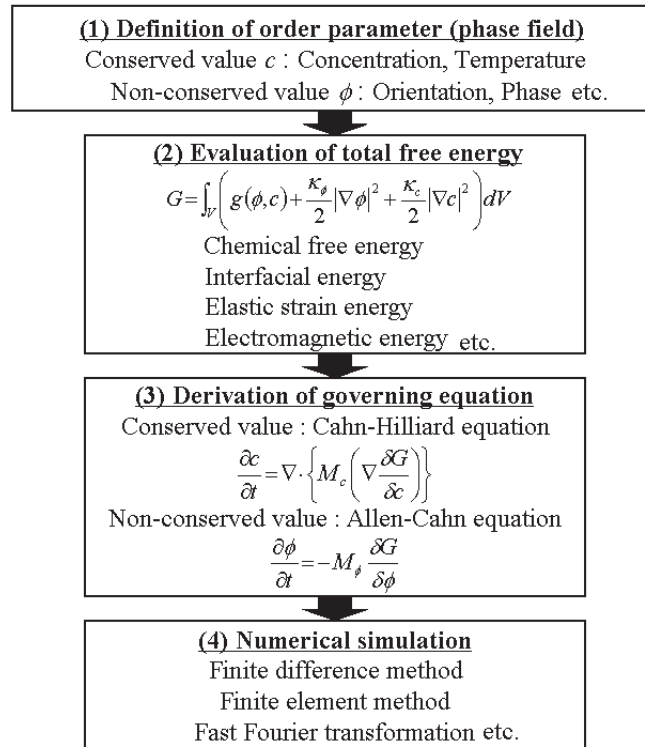


Fig.2.2 Flow chart of Phase-Field simulation.

以上で、組織形成過程を表現する支配方程式が導かれたので、(4) 支配方程式を差分法、有限要素法もしくは高速フーリエ変換などを用いて離散化し、数値解析することで、組織形成シミュレーションが可能となる。このとき、差分格子間隔や有限要素の大きさは、計算時間と解析精度の両立を考慮して決定する必要がある。なお本研究では、この点に留意し、あらかじめ予備計算を行ったうえで、差分格子間隔や有限要素の大きさを決定している。

以上で示したように、Phase-Field 法に基づく組織形成シミュレーション手法、すなわち (1) から (4) の手順は、材料の種類に依存しない。つまり、対象とする現象に合わせて秩序変数を選定し、全自由エネルギーが評価できれば、Phase-Field 法を用いてどのような材料の組織形成過程も同様の方法でモデル化でき、組織形成シミュレーションを実施可能である。次節以降では、鉄鋼材料における拡散変態および無拡散相変態による組織形成過程を表現する Phase-Field モデルを上記のプロセスに従って導出する。

2.2 副格子モデルに基づく Phase-Field 法を用いた拡散変態モデル

本節では、副格子モデルに基づく Phase-Field 法を用いて、Fe-C 合金におけるオーステナイト (γ) 相からフェライト (α) 相への拡散変態である、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の Phase-Field モデルを導出する。はじめに、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う α/γ 界面の移動および炭素拡散挙動を記述する秩序変数と、系の全自由エネルギーを表す Gibbs の自由エネルギー汎関数を定義する。ついで、系の時間変化すなわち $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による界面移動および炭素拡散を表現する秩序変数の時間発展方程式を導出する。また、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による組織形成過程において組織形態を特徴づける界面異方性を表現する勾配エネルギー係数について説明する。

2.2.1 秩序変数と全自由エネルギー

本研究において $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を記述する秩序変数は、 α 相の存在確率を表す phase field ϕ と炭素濃度 u_c とする。Phase field ϕ は α 相において $\phi = 1$ 、 γ 相において $\phi = 0$ の値をとり、図 2.3 に示すように有限の界面幅 δ をもつ界面領域において滑らかに変化する。一方、炭素濃度 u_c は、Fe-C 合金中の炭素原子のモル分率 x_c と副格子濃度 y_c に関係づけられる濃度変数であり、後に示す副格子モデルによる Fe-C 合金の化学的自由エネルギー関数とともに説明する。

本研究の解析対象である Fe-C 合金の全自由エネルギーは、化学的エネルギーと勾配エネルギーの和として、次式に示す Gibbs の自由エネルギー汎関数で表される⁽⁸⁹⁾。

$$G = \int_V \left[g(\phi, u_c, T) + \frac{\epsilon(\theta)^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right] dV \quad (2.7)$$

ここで、 T は絶対温度、 θ は界面の法線方向と解析領域 x 軸とのなす角度として定義される変数である。 $\epsilon(\theta)$ は勾配エネルギー係数であり界面異方性を表現するパラメータである。 $\epsilon(\theta)$ については、次節で詳細に説明する。式 (2.7) の被積分関数第 1 項の $g(\phi, u_c, T)$ は Fe-C 合金の化学的自由エネルギー密度であり、相変態に伴う自由エネルギー変化を表現するために秩序変数、炭素濃度および温度の関数として次式のように定義する。

$$g(\phi, u_c, T) = p(\phi)g^\alpha(u_c, T) + (1 - p(\phi))g^\gamma(u_c, T) + Wq(\phi) \quad (2.8)$$

ここで、 $p(\phi)$ は $p(0)=0$ 、 $p(1)=1$ を満たすエネルギー密度分布関数、 $q(\phi)$ は $q(0) = q(1) = q'(0) = q'(1)=0$ を満たすダブルウェルポテンシャル関数である。 $p(\phi)$ と $q(\phi)$ の関数形

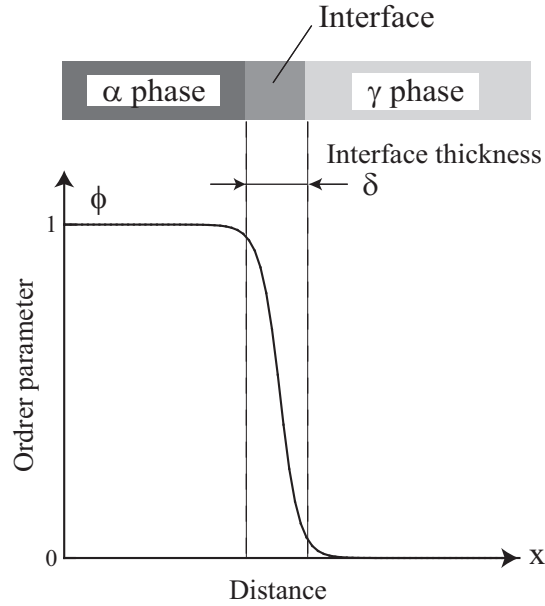


Fig.2.3 Illustration of distribution of phase field ϕ in the α/γ interface region.

は任意であるが、本研究では次式を用いる。

$$p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (2.9)$$

$$q(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (2.10)$$

これらは $0 \leq \phi \leq 1$ の範囲で図 2.4 のように変化する。

式 (2.8) 中の W はエネルギー障壁の高さであり、界面エネルギー σ と界面幅 δ を用いて次式で関係づけることができる (付録 B 参照)。

$$W = \frac{6\sigma b}{\delta} \quad (2.11)$$

ここで、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⁽⁹⁰⁾。 λ は例えば、0.05 や 0.1 のような界面領域入口の phase field ϕ の値である。

式 (2.8) 中の $g^\alpha(u_c, T)$ および $g^\gamma(u_c, T)$ はそれぞれ α 、 γ 単相の化学的自由エネルギー密度であり、各相の化学的自由エネルギーを Fe-C 合金のモル体積で除した値を用いる。Phase-field 法を用いて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を精度良くモデル化するためには、これらの化学的自由エネルギーを正確に表現することが重要であり、本研究では副格子モデル⁽⁹¹⁾に基づく化学的自由エネルギー関数を用いる。すなわち、本研究で解析対象としている Fe-C 合金であれば、 i 相単相 ($i = \alpha, \gamma$) の化学的自由エネルギーは副格子モデルを用いて、

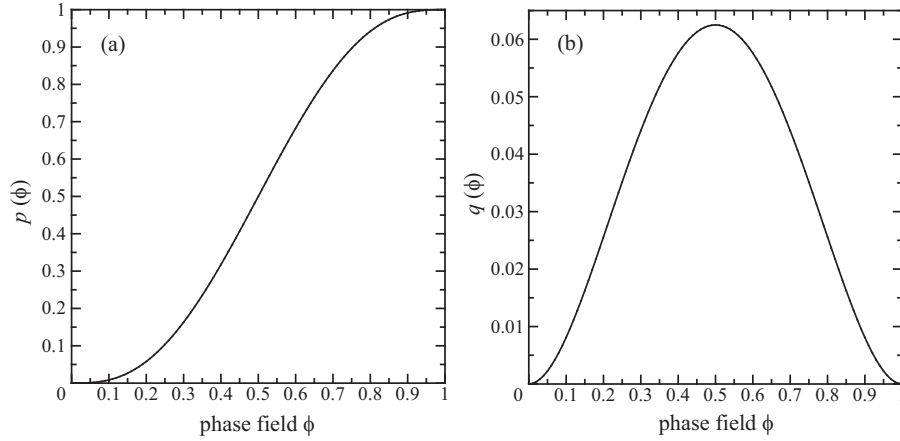


Fig.2.4 Variation of (a) energy density function $p(\theta)$ and double-well potential function $q(\theta)$.

次式の関数形で表される.

$$\begin{aligned}
 G^i(y_c, T) = & ay_{va}^i G_{Fe:Va}^{0,i} + ay_c^i G_{Fe:C}^{0,i} \\
 & + cRT(y_c^i \ln y_c^i + y_{va}^i \ln y_{va}^i) \\
 & + y_c^i y_{va}^i L_{Fe:C;Va}^i
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

ここで、式 (2.12) の右辺第 1 項および第 2 項は Fe 基合金の化学的自由エネルギーを副格子濃度で重み付けした量を表す。そして、第 3 項は原子配置の混合エントロピー発生に起因するエネルギー項、第 4 項は原子間相互作用により生じるエネルギー項を表している。また、例えば $G_{Fe:Va}^{0,i}$ は Fe-C 2 元合金の i 相において置換型位置を全て Fe 原子が占有し、侵入型位置は全て空格子の状態における化学的自由エネルギーを表している。この他、 $G_{Fe:C}^{0,i}$ および $L_{Fe:C;Va}^i (i = \alpha, \gamma)$ などの各種熱力学パラメータは CALPHAD 法⁽⁸⁶⁾ を用いて求めることができ、状態図計算で広く用いられている Thermo-Calc. や Pandat のようなソフトウェアにおいてデータベース化されている。したがって、Fe-C 合金のみならず、Fe-C-Mn 合金など、その他の 2 元系、3 元系の合金に対しても本手法を適用することができる。

式 (2.12) 中、 y_c^i は侵入型位置 (副格子点) における炭素原子の占有率、すなわち炭素原子の副格子濃度を表す。 y_{va}^i は炭素原子が侵入していない副格子点 (空格子点) のモル分率、すなわち空格子濃度である。本モデルにおいては、fcc 結晶の γ 相から bcc 結晶の α 相における結晶構造の変化による副格子点数および空孔点数の変化を考慮し、 α 相と γ 相で統一した濃度変数を用いるために、副格子濃度 y_c^i と空格子濃度 y_{va}^i に以下のような

に關係付けられる炭素濃度変数 u_c を定義する.

$$y_c^i = \frac{ax_c}{c(1-x_c)} = \frac{a}{c}u_c \quad (2.13)$$

$$y_{va}^i = 1 - y_c^i = 1 - \frac{a}{c}u_c \quad (2.14)$$

ここで, a と c は a 個の Fe 原子の格子点に対して c 個の炭素原子が侵入可能であることを表す定数で, α 相においては $a = 1, c = 3$, γ 相においては $a = c = 1$ となる⁽¹²⁾. したがって, 式 (2.13), 式 (2.14) より本研究で用いる Fe-C 合金の α 相と γ 相単相の化学的自由エネルギーは, 濃度変数 u_c の関数としてそれぞれ次式で表される.

$$\begin{aligned} G^\alpha(u_c, T) = & \left(1 - \frac{1}{3}u_c\right) G_{Fe:Va}^{0,\alpha} + \frac{1}{3}u_c G_{Fe:C}^{0,\alpha} \\ & + 3RT \left\{ \frac{1}{3}u_c \ln \frac{1}{3}u_c + \left(1 - \frac{1}{3}u_c\right) \ln \left(1 - \frac{1}{3}u_c\right) \right\} \\ & + \frac{1}{3}u_c \left(1 - \frac{1}{3}u_c\right) L_{Fe:C;Va}^\alpha + G_{mag} \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} G^\gamma(u_c, T) = & (1 - u_c)G_{Fe:Va}^{0,\gamma} + u_c G_{Fe:C}^{0,\gamma} \\ & + RT \{u_c \ln u_c + (1 - u_c) \ln(1 - u_c)\} \\ & + u_c(1 - u_c)L_{Fe:C;Va}^\gamma \end{aligned} \quad (2.16)$$

ここで, α 相は強磁性体であることから, 式 (2.15) の第 5 項に磁気エネルギー項 G_{mag} を加えている. なお, 本研究で用いる Fe-C 合金に対する式 (2.15) と式 (2.16) の $G_{Fe:Va}^{0,i}$, $G_{Fe:C}^{0,i}$ および $L_{Fe:C;Va}^i$ ($i = \alpha, \gamma$) などの各種熱力学パラメータは付録 C に示している.

2.2.2 時間発展方程式

前節で導出した Fe-C 合金の全自由エネルギー G に基づき, phase field ϕ と炭素濃度 u_c の時間発展方程式, すなわち Phase-field 方程式および炭素拡散方程式を導出する.

Phase-field 方程式

Fe-C 合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による結晶構造の変化, すなわち α/γ 界面の移動を記述する非保存量の秩序変数である phase field ϕ の時間発展方程式は, 式 (2.7) の全自由エネルギーを次式に代入して得られる.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \left(\frac{\delta G}{\delta \phi} \right) \quad (2.17)$$

ここで, $\delta G/\delta\phi$ は全自由エネルギー G の phase field ϕ に関する汎関数微分であり, 2次元空間において界面異方性を考慮すると次式で表される.

$$\begin{aligned}\frac{\delta G}{\delta\phi} &= \frac{\partial G}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial G}{\partial\phi_{,x}} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial G}{\partial\phi_{,y}} \right) \\ &= \frac{\partial G}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon(\theta)^2 \frac{\partial\phi}{\partial x} + \epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\phi_{,x}} |\nabla\phi|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon(\theta)^2 \frac{\partial\phi}{\partial y} + \epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\phi_{,y}} |\nabla\phi|^2 \right) \\ &= \frac{\partial G}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon(\theta)^2 \frac{\partial\phi}{\partial x} + \epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,x}} |\nabla\phi|^2 \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon(\theta)^2 \frac{\partial\phi}{\partial y} + \epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,y}} |\nabla\phi|^2 \right)\end{aligned}\quad (2.18)$$

ここで, θ は界面の外向き法線ベクトル $-\nabla\phi$ と x 軸のなす角度である. また, $-\nabla\phi$ の各成分より, 次式が得られる.

$$\frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,x}} = -\frac{\sin^2\theta}{\frac{\partial\phi}{\partial y}}, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,y}} = \frac{\frac{\partial\phi}{\partial x}}{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2} \quad (2.20)$$

これを用いると, 式 (2.18) 中の各項は, 次式で表される.

$$\frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,x}} |\nabla\phi|^2 = -\frac{\partial\phi}{\partial y}, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial\phi_{,y}} |\nabla\phi|^2 = \frac{\partial\phi}{\partial x} \quad (2.22)$$

以上の式 (2.18)~(2.22) より, Phase-field 方程式は次式で表される.

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi}{\partial t} &= M_\phi \left\{ \nabla \cdot (\epsilon(\theta)^2 \nabla\phi) - \frac{\partial g}{\partial\phi} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon(\theta) \frac{\partial\epsilon(\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) \right\}\end{aligned}\quad (2.23)$$

$$\frac{\partial g}{\partial\phi} = 4W\phi(1-\phi) \left(-\frac{15}{2W}\phi(1-\phi)\Delta g^{\gamma\alpha} + \phi - \frac{1}{2} \right) \quad (2.24)$$

$$\Delta g^{\gamma\alpha} = g^\gamma(u_c, T) - g^\alpha(u_c, T) \quad (2.25)$$

ここで, 式 (2.23) の M_ϕ は phase field ϕ の易動度であり, α/γ 界面の易動度 $M_{\alpha/\gamma}$ ⁽⁹²⁾, W および $\epsilon(\theta)$ と次式のように関係付けれる. (付録 D 参照).

$$M_\phi = \frac{\sqrt{2W}}{6\epsilon_0} M_{\alpha/\gamma} \quad (2.26)$$

炭素拡散方程式

次に, $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う炭素拡散挙動を表現する炭素拡散方程式を導出する. 保存量の秩序変数である炭素濃度 u_c の時間発展方程式は, 次式に示す拡散方程式から導出される.

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_{u_c}(\phi, u_c, T) \nabla \left(\frac{\delta G}{\delta u_c} \right) \right\} \quad (2.27)$$

ここで, $\delta G / \delta u_c$ は全自由エネルギーの炭素濃度 u_c による汎関数微分であり, 次式で表される.

$$\frac{\delta G}{\delta u_c} = \frac{\partial G}{\partial u_c} \quad (2.28)$$

また, 式 (2.27) に式 (2.7) の全自由エネルギーを代入することで, 非線形炭素拡散方程式が次式のように導出される.

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_{u_c}(\phi, u_c, T) \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \nabla u_c + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \nabla \phi \right) \right\} \quad (2.29)$$

ここで, $M_{u_c}(\phi, u_c, T)$ は Fe-C 合金中の炭素原子の拡散係数に対応する u_c の易動度を表し, Fe-C 合金のモル体積 v_m , 副格子濃度 u_c , 空格子濃度 y_c および炭素原子の易動度 M_c と次式で関係付けられる⁽⁸⁹⁾⁽⁹³⁾.

$$M_{u_c}(\phi, u_c, T) = u_c y_v v_m M_c \quad (2.30)$$

先に示したように空格子濃度 y_v は α 相において $y_v = 1 - u_c/3$, γ 相において $y_v = 1 - u_c$ であるため, 空格子濃度が界面領域で滑らかに変化することを表現するために $p(\phi)$ を用いて, 次式を仮定する.

$$y_v = p(\phi) \left(1 - \frac{u_c}{3} \right) + (1 - p(\phi))(1 - u_c) \quad (2.31)$$

また, M_c は Fe-C 合金における炭素原子の易動度であるが, α 相における炭素原子の易動度は γ 相に比べて非常に大きい. したがって, M_c が界面領域で滑らかに変化するように, α 相における易動度 M_c^α , および γ 相における易動度 M_c^γ を用いて次式で表す⁽⁹⁴⁾⁽⁹⁵⁾.

$$M_c = (M_c^\alpha)^{p(\phi)} (M_c^\gamma)^{(1-p(\phi))} \quad (2.32)$$

2.2.3 界面異方性

α 相の組織形態は, α/γ 界面構造に依存して変化する界面エネルギーの異方性に大きく影響を受ける. そこで本研究では, 次式に示すように勾配エネルギー係数 $\epsilon(\theta)$ を界面

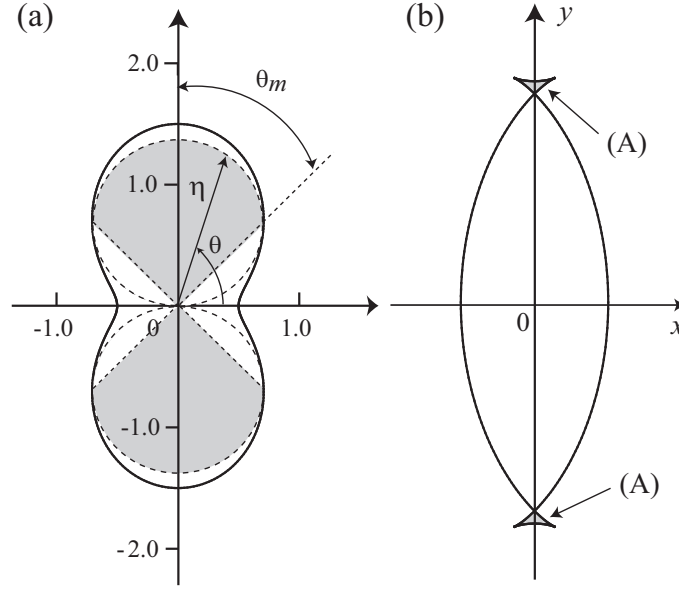


Fig.2.5 Interface anisotropy for $k = 2$, $\xi = 0.6$, $\theta_0 = 90^\circ$; (a) polar plot of anisotropy function $\eta(\theta)$ and (b) equilibrium shape of interface.

エネルギー σ , 界面厚さ δ および異方性関数 $\eta(\theta)$ を用いて, 方向依存性をもたせることで界面異方性を表現する (付録 B 参照).

$$\epsilon(\theta) = \epsilon_0 \eta(\theta) = \sqrt{\frac{3\sigma\delta}{b}} \eta(\theta) \quad (2.33)$$

ここで, θ は界面の方向を示しており, 界面の外向き法線方向と x 軸のなす角度として定義する. また, 異方性関数 $\eta(\theta)$ は次式を採用する.

$$\eta(\theta) = 1 + \xi \cos k(\theta - \theta_0) \quad (2.34)$$

ここで, ξ , k , θ_0 はそれぞれ異方性強度, 異方性モード数, 優先成長方向である. 図 2.5(a) に $\xi = 0.6$, $k = 2$, $\theta_0 = 90^\circ$ における $\eta(\theta)$ の極座標プロットを実線で示す. このとき, 式 (2.34) により求められる界面の平衡形は, Wulff の定理⁽⁹⁶⁾ により図 2.5(b) のようになる. $\xi \geq 1/(k^2 - 1)$ を満たすような異方性強度 ξ の場合には, 図 2.5(b) 中の (A) で示すような, 界面の平衡形状において不連続な部分が発生する. この部分に対応する θ の領域は図 2.5(a) の灰色部分で表され, 式 (2.34) を用いた場合, 数値計算を安定に行うことができなくなる. そこで本研究では, この θ の範囲 $2\pi i/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi i/k + \theta_m$ ($i = 0, 1, 2, \dots$) に対して, 次式に示すように $\eta(\theta)$ を修正することで, 広範な界面異方性

をモデル化する⁽⁹⁰⁾⁽⁹⁷⁾.

$$\eta(\theta) = \begin{cases} 1 + \xi \cos k(\theta - \theta_0) \equiv \bar{\eta}(\theta) \\ \text{(for } 2\pi i/k + \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi(i+1)/k + \theta_m) \\ \frac{\bar{\eta}(\theta_m + \theta_0)}{\cos \theta_m} \cos(\theta - \theta_0) \\ \text{(for } 2\pi i/k - \theta_m \leq \theta - \theta_0 \leq 2\pi i/k + \theta_m) \end{cases} \quad (2.35)$$

ここで, θ_m は図 2.5(a) に示すように, 式 (2.34) の極座標プロットと破線で示す半径 $\bar{\eta}(\theta_m + \theta_0)/\cos \theta_m$ の内接円との接点における角度 θ から y 軸までの角度領域の大きさに対応することから, 以下の式で求めることができる.

$$\eta(\theta_m) \sin \theta_m + \eta(\theta_m) \cos \theta_m = 0 \quad (2.36)$$

なお, 式 (2.35) の修正計算は, $k = 2$ においては $\xi = 0.33$ 以上, $k = 4$ においては $\xi = 0.06$ 以上の異方性強度で必要となる.

2.2.4 時間発展方程式の離散化手法

Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションは、秩序変数の時間発展方程式を離散化し、数値解析することにより可能となる。以下では、例として、前節で示した Phase-field 方程式 (2.23) と炭素拡散方程式 (2.29) を差分法および有限要素法を用いて、離散表示する。なお、次節以降に示す Phase-Field モデルの離散化についても本節で示す手法を用いる。

差分法による時間発展方程式の離散化

Phase-field 方程式 (2.23) と炭素拡散方程式 (2.29) を、時間に関しては前進差分法、空間に関しては 2 階中央差分法を用いて離散化する。一次元における時間発展方程式は式 (2.23) と式 (2.29) より、それぞれ次式で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_0^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial g}{\partial \phi} \right\} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ M_{u_c}(\phi, u_c, T) \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} \quad (2.38)$$

なお、以下の差分方程式の導出過程においては、図 2.6 に示す差分格子を用いる。差分格子点 i における式 (2.37) および式 (2.38) の時間および空間に関する各項は、それぞれ以下のように差分表示できる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi_i^{t+dt} - \phi_i^t}{dt} \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \frac{u_{ci}^{t+dt} - u_{ci}^t}{dt} \quad (2.40)$$

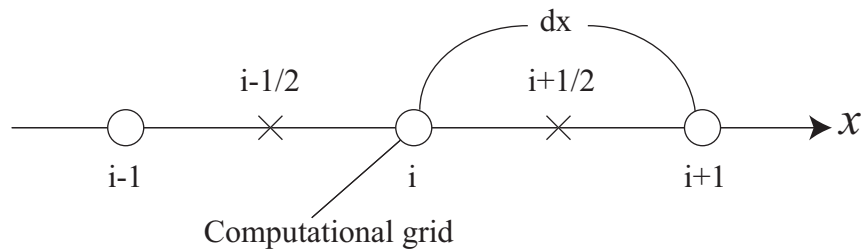


Fig.2.6 Finite difference grids.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_0^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) &= \frac{1}{dx} \left\{ \left(\epsilon_0^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} - \left(\epsilon_0^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{dx^2} \left\{ \left(\frac{\epsilon_{0i+1}^2 + \epsilon_{0i}^2}{2} \right) (\phi_{i+1} - \phi_i) - \left(\frac{\epsilon_{0i}^2 + \epsilon_{0i-1}^2}{2} \right) (\phi_i - \phi_{i-1}) \right\}\end{aligned}\quad (2.41)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \left\{ M_{u_c} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} &= \frac{1}{dx} \left[\left\{ M_{u_c} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\}_{i+1/2} \right. \\ &\quad \left. - \left\{ M_{u_c} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\}_{i-1/2} \right]\end{aligned}\quad (2.42)$$

ここで、上付き添え字の t , dt はそれぞれ現在時刻および時間増分を表す。さらに、式 (2.42) 中の各項は以下のように差分表示できる。

$$\begin{aligned}\left\{ M_{u_c} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\}_{i+1/2} &= \frac{M_{u_{ci+1}} + M_{u_{ci}}}{2} \left[\frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \right)_{i+1} + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \right)_i \right\} \frac{u_{ci+1} - u_{ci}}{dx} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \right)_{i+1} + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \right)_i \right\} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{dx} \right]\end{aligned}\quad (2.43)$$

$$\begin{aligned}\left\{ M_{u_c} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \frac{\partial u_c}{\partial x} + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\}_{i-1/2} &= \frac{M_{u_{ci}} + M_{u_{ci-1}}}{2} \left[\frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \right)_i + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \right)_{i-1} \right\} \frac{u_{ci} - u_{ci-1}}{dx} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \right)_i + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \right)_{i-1} \right\} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{dx} \right]\end{aligned}\quad (2.44)$$

2次元解析における時間発展方程式の離散化

つづいて、Phase-field 方程式 (2.23) と炭素拡散方程式 (2.29) を、空間に関しては有限要素法、時間に関しては差分法を用いた離散化手法を示す。

Phase-field 方程式の有限要素法, 差分法

2次元空間で $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α/γ 界面の移動を記述する Phase-field 方程式を、次に示す。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} &= M_\phi \left\{ \nabla \cdot (\epsilon(\theta)^2 \nabla \phi) - \frac{\partial g}{\partial \phi} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon(\theta) \frac{\partial \epsilon(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon(\theta) \frac{\partial \epsilon(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\}\end{aligned}\quad (2.45)$$

式 (2.45) を重みつき残差法を用いて弱形式表示するために、両辺に $\delta \phi$ をかけて積分すると、

$$\int_A \left\{ \frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\epsilon^2 \nabla \phi) + \frac{\partial g}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} \delta \phi dA = 0 \quad (2.46)$$

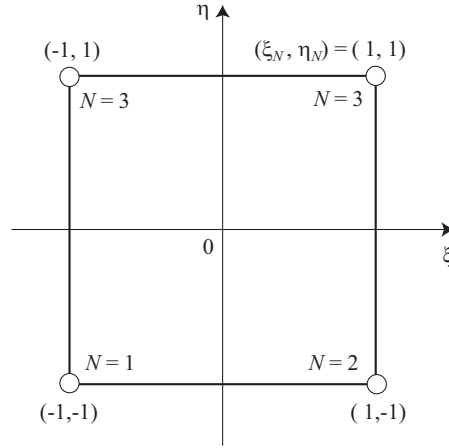


Fig.2.7 Isoparametric quadrilateral element.

となる. 式 (2.46) の左辺被積分関数第 2, 4, 5 項に Green の定理を適用し, 整理すると次式を得る.

$$\begin{aligned} & \int_A \left\{ \frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} \delta \phi + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \delta \phi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial \delta \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial g}{\partial \phi} \delta \phi - \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial \delta \phi}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \delta \phi}{\partial y} \right) \right\} dA \\ & = \int_l \left\{ \epsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y \right) - n_x \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial y} + n_y \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} \delta \phi dl \end{aligned} \quad (2.47)$$

ここで, n_x, n_y はそれぞれ界面の外向き法線ベクトルの x 方向, y 方向成分である. 本研究では外部からの物質の出入りは考慮しないため, 式 (2.47) 右辺の線積分項を零とする.

式 (2.47) を有限要素法を用いて離散化するために, 要素内の任意の点における phase field ϕ と $\delta \phi$ の値を, 有限要素の節点 $N(N = 1, 2, 3, 4)$ での形状関数 ψ_N と phase field ϕ_M の線形結合によって表示する.

$$\phi = \psi_N \phi_N \quad (2.48)$$

$$\delta \phi = \psi_M \delta \phi_M \quad (2.49)$$

また, 本研究では図 2.7 に示す 4 節点アイソパラメトリック要素を採用する. このとき, 形状関数 ψ_N は自然座標系 (ξ, η) において次式で表される.

$$\psi_N = \frac{1}{4} (1 - \xi_N \xi) (1 - \eta_N \eta) \quad (2.50)$$

式 (2.48), (2.49) を式 (2.47) に代入すると,

$$\int_A \left\{ \frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi_N}{\partial t} \psi_N \psi_M \delta \phi_M + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \phi_N \frac{\partial \psi_M}{\partial x} \delta \phi_M + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \phi_N \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \delta \phi_M \right) + \frac{\partial g}{\partial \phi} \psi_M \delta \phi_M - \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial y} \phi_N \frac{\partial \psi_M}{\partial x} \delta \phi_M - \frac{\partial \psi_N}{\partial x} \phi_N \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \delta \phi_M \right) \right\} dA = 0 \quad (2.51)$$

式(2.51)は任意の $\delta \phi_M$ で成立するので、次式に示す各要素における有限要素方程式を得る.

$$[K_\phi^1] \left\{ \frac{\partial \phi_N}{\partial t} \right\} + [K_\phi^2] \{ \phi_N \} = \{ f_\phi \} \quad (2.52)$$

ここで、各要素に対するマトリクスは以下ようになる.

$$[K_\phi^1] = \int_A \frac{1}{M_\phi} \psi_N \psi_M dA \quad (2.53)$$

$$[K_\phi^2] = \int_A \left\{ \epsilon^2 \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) - \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} - \frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \right\} dA \quad (2.54)$$

$$\{ f_\phi \} = - \int_A \frac{\partial g}{\partial \phi} \psi_M dA \quad (2.55)$$

これらのマトリクスに対して、次式に示す空間座標系 (x, y) と自然座標系 (ξ, η) における関数 $F(x, y)$ の要素全域の積分の関係式

$$\iint F(x, y) dx dy = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F(\xi, \eta) |J| d\xi d\eta \quad (2.56)$$

を用いると、式(2.53)~式(2.55)は以下のように表示することができる.

$$[K_\phi^1] = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{1}{M_\phi} \psi_N \psi_M |J| d\xi d\eta \quad (2.57)$$

$$[K_\phi^2] = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left\{ \epsilon^2 \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) - \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} - \frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \right\} |J| d\xi d\eta \quad (2.58)$$

$$\{ f_\phi \} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 - \frac{\partial g}{\partial \phi} \psi_M |J| d\xi d\eta \quad (2.59)$$

さらに、次式に示す2点ガウス積分を行う.

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 f(\xi_i, \eta_j) w_i w_j \quad (2.60)$$

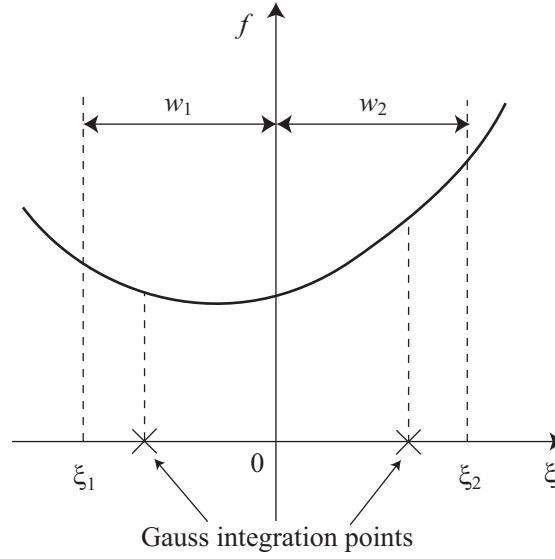


Fig.2.8 Gauss integration

ここで, w_i, w_j は図 2.8 に示す重み, 添え字 i, j は積分するガウス点を示している. これにより, 各要素の有限要素方程式および各マトリクス式 (2.57) ~ 式 (2.59) は次式で表される.

$$[K_\phi^1] \left\{ \frac{\partial \phi_N}{\partial t} \right\} + [K_\phi^2] \{\phi_N\} = \{f_\phi\} \quad (2.61)$$

$$[K_\phi^1] = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left(\frac{1}{M_\phi} \psi_N \psi_M \right) w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.62)$$

$$[K_\phi^2] = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left\{ \epsilon^2 \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) - \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} - \frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \right\} w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.63)$$

$$\{f_\phi\} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{\partial g}{\partial \phi} \psi_M \right) w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.64)$$

一方, 時間に対してはクランク・ニコルソンの中央差分を用いて離散化する. クランク・ニコルソンの中央差分においては時間 $t + \frac{dt}{2}$ における節点 N の phase field $\phi_N^{t+\frac{dt}{2}}$ を,

$$\phi_N^{t+\frac{dt}{2}} = \frac{1}{2} (\phi_N^{t+dt} + \phi_N^t) \quad (2.65)$$

と表し, 時間 $t + \frac{dt}{2}$ における節点 N の Phase field の時間微分を

$$\frac{d\phi_N^{t+\frac{dt}{2}}}{dt} = \frac{\phi_N^{t+dt} - \phi_N^t}{dt} \quad (2.66)$$

と表す. 式 (2.65) と式 (2.66) を式 (2.61) ~ 式 (2.64) に代入し, 全要素について足し合わせることで全解析領域に対する Phase-field 有限要素方程式を得る.

$$[K_\phi^A] \{\phi^{t+dt}\} = [K_\phi^B] \{\phi^t\} + \{F_\phi\} \quad (2.67)$$

$$[K_\phi^A] = \sum_{element} [K_\phi^I] = \sum_{element} \left\{ \frac{1}{dt} [K_\phi^1] + \frac{1}{2} [K_\phi^2] \right\} \quad (2.68)$$

$$[K_\phi^B] = \sum_{element} [K_\phi^{II}] = \sum_{element} \left(\frac{1}{dt} [K_\phi^1] - \frac{1}{2} [K_\phi^2] \right) \quad (2.69)$$

$$\{F_\phi\} = \sum_{element} (\{f_\phi\}) \quad (2.70)$$

炭素拡散方程式の有限要素法, 差分法

続いて, 次式に示す炭素拡散方程式を有限要素法および差分法を用いて離散化する.

$$\frac{\partial u_c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_{u_c}(\phi, u_c, T) \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \nabla u_c + \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \nabla \phi \right) \right\} \quad (2.71)$$

ここで, 以下の離散化過程を簡単に示すため,

$$a = \frac{\partial^2 g}{\partial u_c^2} \quad (2.72)$$

$$b = \frac{\partial^2 g}{\partial u_c \partial \phi} \quad (2.73)$$

とおく. 式(2.71)を重みつき残差法を用いて弱形式表示するために, 両辺に δu_c をかけて積分を行うと,

$$\int_A \left[\frac{\partial u_c}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ M_{u_c} \left(a \frac{\partial u_c}{\partial x} + b \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ M_{u_c} \left(a \frac{\partial u_c}{\partial y} + b \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right\} \right] \delta u_c dA = 0 \quad (2.74)$$

式(2.74)の左辺被積分関数第2, 3項に Green の定理を適用し, 整理すると次式を得る.

$$\begin{aligned} & \int_A \left[\frac{\partial u_c}{\partial t} \delta u_c + M_{u_c} \left\{ \left(a \frac{\partial u_c}{\partial x} + b \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \frac{\partial \delta u_c}{\partial x} + \left(a \frac{\partial u_c}{\partial y} + b \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \frac{\partial \delta u_c}{\partial y} \right\} \right] dA \\ & = \int_l M_{u_c} \left\{ n_x \left(a \frac{\partial u_c}{\partial x} + b \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + n_y \left(a \frac{\partial u_c}{\partial y} + b \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right\} \delta u_c dl \end{aligned} \quad (2.75)$$

ここで, 外部からの炭素原子の拡散流束は零とするため, 式(2.75)の右辺の線積分項を零とする. 次に, 有限要素法により離散化するため, 有限要素内の任意の点における炭素濃度 u_c , δu_c を形状関数 ψ_N とそれぞれの節点での値の線形結合によって次式のように表示する.

$$u_c = \psi_N u_{cN} \quad (2.76)$$

$$\delta u_c = \psi_M \delta u_{cM} \quad (2.77)$$

これらを, 式 (2.75) に代入して, 整理すると次式を得る.

$$\begin{aligned} \int_A \left[\frac{\partial u_{cN}}{\partial t} \psi_N \psi_M + M_{uc} a \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) u_{cN} \right] dA \\ = \int_A \left\{ -M_{uc} b \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \phi_N \right\} dA \end{aligned} \quad (2.78)$$

したがって, 各要素における有限要素方程式は, 次式で表される.

$$[K_c^1] \left\{ \frac{\partial u_{cN}}{\partial t} \right\} + [K_c^2] \{u_{cN}\} = \{f_c\} \quad (2.79)$$

$$[K_c^1] = \int_A \psi_N \psi_M dA \quad (2.80)$$

$$[K_c^2] = \int_A M_{uc} a \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) dA \quad (2.81)$$

$$\{f_c\} = \int_A -M_{uc} b \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \phi_N dA \quad (2.82)$$

ここで, 前節の Phase-field 方程式の離散化と同様, 空間座標系 (x, y) から自然座標系 (ξ, η) への座標変換および2点ガウス積分を行うと, 以下のようなになる.

$$[K_c^1] = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (\psi_N \psi_M)_{ij} w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.83)$$

$$[K_c^2] = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left\{ M_{uc} a \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \right\}_{ij} w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.84)$$

$$\{f_c\} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left\{ -M_{uc} b \left(\frac{\partial \psi_N}{\partial x} \frac{\partial \psi_M}{\partial x} + \frac{\partial \psi_N}{\partial y} \frac{\partial \psi_M}{\partial y} \right) \phi_N \right\}_{ij} w_i w_j |J|_{ij} \quad (2.85)$$

さらに, 時間に関しては, クランクニコルソン中央差分法を用いて離散化する. クランク・ニコルソンの中央差分法においては時間 $t + \frac{dt}{2}$ における節点 N の炭素温度 $u_{cN}^{t+\frac{dt}{2}}$ を

$$u_{cN}^{t+\frac{dt}{2}} = \frac{1}{2} (u_{cN}^{t+dt} + u_{cN}^t) \quad (2.86)$$

と表し, 時間 $t + \frac{dt}{2}$ における節点 N の炭素濃度の時間微分を

$$\frac{du_{cN}^{t+\frac{dt}{2}}}{dt} = \frac{u_{cN}^{t+dt} - u_{cN}^t}{dt} \quad (2.87)$$

と表す. 式 (2.86) と式 (2.87) を式 (2.79) から式 (2.82) に代入し, 全有限要素で足し合わせるにより, 数値シミュレーションで用いる炭素拡散有限要素方程式を得る.

$$[K_c^A] \{u_c^{t+dt}\} = [K_c^B] \{u_c^t\} + \{F_c\} \quad (2.88)$$

$$[K_c^A] = \sum_{element} [K_c^I] = \sum_{element} \left\{ \frac{1}{dt} [K_c^1] + \frac{1}{2} [K_c^2] \right\} \quad (2.89)$$

$$[K_c^B] = \sum_{element} [K_c^{II}] = \sum_{element} \left\{ \frac{1}{dt} [K_c^1] - \frac{1}{2} [K_c^2] \right\} \quad (2.90)$$

$$[F_c] = \sum_{element} \{f_c\} \quad (2.91)$$

2.3 Multi-Phase-Field 法を用いた拡散変態モデル

前節で導出した副格子モデルに基づく拡散変態の Phase-Field モデルは、実験や CALPHAD 法で得られる化学的自由エネルギー関数を直接利用することができるため、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α/γ 界面の移動や炭素拡散を定量的に記述できる利点がある。しかしながら、副格子モデルを用いた Phase-Field モデルでは数値計算が煩雑になるうえ、 α/α 界面や γ/γ 界面挙動を正確に表現することはできない。したがって、多結晶体における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態やパーライト変態などの拡散変態を再現可能であり、かつ計算負荷の小さい Phase-Field モデルの構築が必要である。これに対し、Chen ら⁽⁹⁸⁾ や Steinbach ら^(99, 100) によって、多結晶体中における相変態や析出現象および粒成長を表現する Multi-Phase-Field モデルが提案されている。本節では、Steinbach らが提案する Generalized Multi-Phase-Field 法⁽¹⁰¹⁾ を採用し、平衡状態図に基づいて多結晶体におけるフェライト変態やパーライト変態を表現可能な Phase-Field モデルを導出する。さらに、変態駆動力などの各種パラメータ導出に用いる、線形化平衡状態図について説明する。

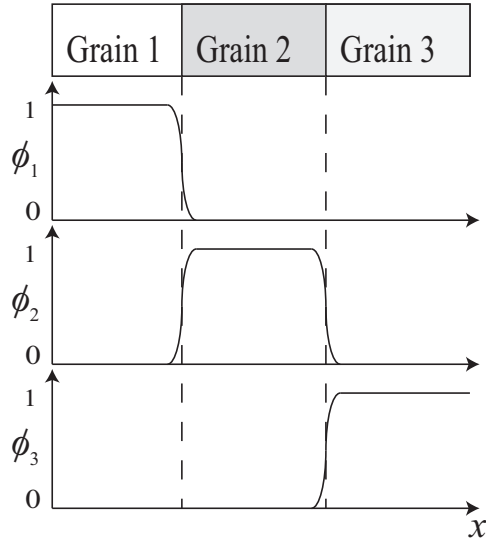
2.3.1 秩序変数と全自由エネルギー

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。鉄鋼材料における相変態を考える場合、秩序変数として、任意の点における粒 i の存在確率を表す phase field ϕ_i と炭素濃度 C を定義する。例えば、 $N = 3$ の場合の phase field ϕ_i は図 5.3 に示すように、 ϕ_1 は粒 1 内で $\phi_1 = 1$ 、粒 2、粒 3 では $\phi_1 = 0$ となる変数である。また、 ϕ_1 が 0 から 1 に滑らかに変化する領域を粒 1 と他の粒との界面と定義する。さらに、 ϕ_i はそれぞれ独立な変数でなく、任意点で次式を満足する必要がある⁽¹⁰¹⁾。

$$\sum_{i=1}^N \phi_i = 1 \quad (2.92)$$

一方、粒 i が γ 相、 α 相、 θ 相かによって、それぞれの粒における炭素原子の固溶度が異なるため、界面において濃度分配が生じる。ここでは、これを表現するために、それぞれの結晶粒内の炭素濃度を表す変数 C_i を導入し、炭素濃度 C を phase field ϕ_i と変数 C_i の線形関数として次式で表されるものとする⁽¹⁰²⁾。

$$C = \sum_{i=1}^N \phi_i C_i = \phi_1 C_1 + \phi_2 C_2 + \phi_3 C_3 + \dots \quad (2.93)$$

Fig.2.9 Distributions of phase field ϕ_i ($i=1, 2,$ and 3).

以後, 本研究では炭素濃度 C と区別するために C_i を局所濃度と呼ぶ. 局所濃度 C_i の決定方法については後に説明する.

以上で定義した秩序変数を用いて, 系の全自由エネルギーは, 次式で表される⁽¹⁰¹⁾.

$$G = \int_V \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N (W_{ij} \phi_i \phi_j) + g_e \right] dV \quad (2.94)$$

ここで, 第一項が勾配エネルギー項, 第二項と第三項が化学的自由エネルギーに対応する項である. a_{ij} は勾配エネルギー係数, W_{ij} はエネルギー障壁の高さを表す. また, 式中の下添き添え字 $[]_{ij}$ は, テンソルを表す記号ではない. なお, 式 (2.94) は $N=2$ の系に適用した場合, $\phi_1 = \phi$, $\phi_2 = 1 - \phi$ となるので式 (2.1) に示したような Gibbs の自由エネルギー汎関数に帰着する.

$$G = \int_V \left\{ g_e + W_{12} \phi (1 - \phi) + \frac{a_{12}^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right\} dV \quad (2.95)$$

2.3.2 時間発展方程式

Phase-field 方程式

Steinbach らが提案する Generalized Multi-Phase-Field 法⁽¹⁰¹⁾ を用いて ϕ_i の時間発展方程式を導出する. この手法を用いることで, N 個の粒を含む系に対して, 任意点で N 個全ての phase field ϕ_i の発展を考えるのではなく, N 個のうち, その点に局所的に

存在する $n (\leq N)$ 個の粒に対応する ϕ_i の時間変化のみを計算することができる。これにより、計算量を大幅に減少することが可能となる。そこで、新たに $0 < \phi_i \leq 1$ を満たす点で 1、それ以外の点で 0 の値をとるステップ関数 σ_i を定義する。このとき、局所的に存在する結晶粒の数 n は次式で表される。

$$n = \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.96)$$

ここで、ラグランジュの未定乗数法を用いて式 (2.94) の自由エネルギー汎関数に式 (2.92) の条件を含めると、 $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ を独立変数として取り扱った場合の全自由エネルギーは次式で表される。

$$\Gamma = \int_V \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + W_{ij} \phi_i \phi_j \right) + g_e + \lambda \left(\sum_{i=1}^n \phi_i - 1 \right) \right\} dV \quad (2.97)$$

ここで、表記を簡単にするために、

$$g = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + W_{ij} \phi_i \phi_j \right) \quad (2.98)$$

とすると、式 (2.97) は次式のように表される。

$$\Gamma = \int_V \left\{ g + g_e + \lambda \left(\sum_{i=1}^n \phi_i - 1 \right) \right\} dV \quad (2.99)$$

さて、phase field ϕ_i は非保存量であるため、式 (2.99) より ϕ_i の時間発展方程式は次式から導出される。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M_{ij}^{\phi} \frac{\delta \Gamma}{\delta \phi_i} \quad (2.100)$$

ここで M_{ij}^{ϕ} は粒 i と粒 j 間の界面のモビリティであり、 $\phi_i' = \frac{1}{M_{ij}^{\phi}} \frac{\partial \phi_i}{\partial t}$ とおくと次式のように表記できる。

$$\phi_i' = -\frac{\delta \Gamma}{\delta \phi_i} = -\frac{\delta G}{\delta \phi_i} - \lambda \quad (2.101)$$

さらに、次式で表される Interface field ψ_{ij} を定義する。

$$\psi_{ij} = \phi_i - \phi_j \quad (i < j) \quad (2.102)$$

式 (2.92) に式 (2.102) を代入すると、

$$\sum_{i=1}^n \phi_i = \sum_{i=1}^n (\psi_{ij} + \phi_j) = \sum_{i=1}^n \psi_{ij} + n\phi_j = 1 \quad (2.103)$$

となる. 上式で i と j を入れ替えると, $\psi_{ij} = -\psi_{ji}$ より,

$$\sum_{j=1}^n \psi_{ji} + n\phi_i = \sum_{j=1}^n (-\psi_{ij}) + n\phi_i = 1 \quad (2.104)$$

であるので, 式 (2.104) より ϕ_i が満たすべき条件として次式が得られる.

$$\phi_i = \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^n \psi_{ij} + 1 \right) \quad (2.105)$$

Interface field ψ_{ij} の時間発展方程式が,

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -M_{ij}^{\phi} \frac{\delta G}{\delta \psi_i} \quad (2.106)$$

で表されるとすれば, $\psi_{ij}' = \frac{1}{M_{ij}^{\phi}} \frac{\partial \psi_{ij}}{\partial t}$ を用いると式 (2.102) より, 次式のように表される.

$$\begin{aligned} \psi_{ij}' &= \phi_i' - \phi_j' \\ &= \left(-\frac{\delta G}{\delta \phi_i} - \lambda \right) - \left(-\frac{\delta G}{\delta \phi_j} - \lambda \right) \\ &= -\frac{\delta G}{\delta \phi_i} + \frac{\delta G}{\delta \phi_j} \end{aligned} \quad (2.107)$$

一方, 式 (2.105) より,

$$\phi_i' = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \psi_{ij}' \quad (2.108)$$

であるので, これに式 (2.107) を代入すると, 次式が得られる.

$$\begin{aligned} \phi_i' &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\phi_i' - \phi_j') \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(-\frac{\delta G}{\delta \phi_i} + \frac{\delta G}{\delta \phi_j} \right) \\ &= -\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\frac{\delta G}{\delta \phi_i} - \frac{\delta G}{\delta \phi_j} \right) \end{aligned} \quad (2.109)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \frac{\delta G}{\delta \phi_i} &= \frac{\partial g}{\partial \phi_i} - \nabla \cdot \frac{\partial g}{\partial \nabla \phi_i} + \frac{\partial g_e}{\partial \phi_i} \\ &= \sum_{k=1(k \neq i)}^n (W_{ik} \phi_k) + \sum_{k=1(k \neq i)}^n \left(\frac{a_{ik}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) + \frac{\partial g_e}{\partial \phi_i} \\ &= \sum_{k=1(k \neq i)}^n \left(W_{ik} \phi_k + \frac{a_{ik}^2}{2} \nabla^2 \phi_k \right) + \frac{\partial g_e}{\partial \phi_i} \end{aligned} \quad (2.110)$$

で表されるので、これを式 (2.109) に代入すれば、 ϕ_i の時間発展方程式を得ることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} &= - \sum_{j=1}^n \frac{M_{ij}^\phi}{n} \left(\frac{\partial G}{\partial \phi_i} - \frac{\partial G}{\partial \phi_j} \right) \\ &= - \sum_{j=1}^n \frac{M_{ij}^\phi}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} + \left(\frac{\partial g_e}{\partial \phi_i} - \frac{\partial g_e}{\partial \phi_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.111)$$

ここで、右辺 [] 内は $k \neq i, k \neq j$ の条件が必要であるが、式の表記を簡単にするために、 $a_{ii} = 0, W_{ii} = 0$ としている。

式 (2.111) の右辺括弧内の第三項は駆動力項を表しており、

$$\frac{\partial g_e}{\partial \phi_i} - \frac{\partial g_e}{\partial \phi_j} = - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \quad (2.112)$$

とすると、式 (2.111) は次式のように表すことができる。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = - \sum_{j=1}^n \frac{M_{ij}^\phi}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (2.113)$$

ここで、 $\frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j}$ は、 $n = 2$ すなわち $\phi_1 = \phi, \phi_2 = 1 - \phi$ で表されるとき、

$$\int_0^1 \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_1 \phi_2} d\phi = \int_0^1 \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi(1-\phi)} d\phi = 1 \quad (2.114)$$

つまり界面領域での駆動力項の積分値が ΔE_{ij} と等しくなるようにしている。

ΔE_{ij} は相変態に伴う自由エネルギー変化量を表し、その導出については 2.3.3 節に示す。また、式 (2.113) 中の勾配エネルギー係数 a_{ij} 、エネルギー障壁の高さ W_{ij} 、モビリティ M_{ij}^ϕ の導出方法については付録 E に示す。

炭素拡散方程式

鉄鋼材料における拡散変態においては、炭素原子の拡散による炭素濃度の変化が組織の成長速度や形態を特徴付けるため、炭素拡散方程式を解く必要がある。本研究では、炭素拡散方程式を全自由エネルギーをポテンシャルとする発展方程式としてでなく、2.3.1 節で述べた局所濃度 C_i を用いて現象論的に炭素拡散方程式を導出する。すなわち炭素原子の拡散流束 J が各結晶粒における拡散流束 J_i と phase field ϕ_i の線形関

数として表現されると仮定し, 拡散方程式を次式のように表す⁽¹⁰²⁾.

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \cdot J \\ &= \nabla \cdot (\phi_1 J_1 + \phi_2 J_2 + \cdots \phi_N J_N)\end{aligned}\quad (2.115)$$

各粒内で, 拡散係数 D_i が一定であるとすれば, $J_i = D_i \nabla C_i$ と表すことができるので式(2.115)は,

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \cdot (\phi_1 D_1 \nabla C_1 + \phi_2 D_2 \nabla C_2 + \cdots \phi_N D_N \nabla C_N) \\ &= \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N \phi_i D_i \nabla C_i \right)\end{aligned}\quad (2.116)$$

となる. このとき, 式(2.116)は $N = 1$ のとき, すなわち粒界以外の点では通常の拡散方程式に帰着する. また, 例えば $N = 3$ であり, 粒1が γ 相, 粒2が α 相, 粒3がセメントイト(θ)相の場合であれば, 式(2.116)は次式のように表される.

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \cdot J \\ &= \nabla \cdot (\phi_1 J_1 + \phi_2 J_2 + \phi_3 J_3) \\ &= \nabla \cdot (\phi_1 D_1 \nabla C_1 + \phi_2 D_2 \nabla C_2 + \phi_3 D_3 \nabla C_3)\end{aligned}\quad (2.117)$$

このとき, 各相の炭素拡散係数 $D_1 = D^\gamma$, $D_2 = D^\alpha$, $D_3 = D^\theta$ はいずれも Arrhenius 型の次式を用いる.

$$\begin{aligned}D^\gamma &= D_0^\gamma \exp\left(\frac{-Q^\gamma}{RT}\right) \\ D^\alpha &= D_0^\alpha \exp\left(\frac{-Q^\alpha}{RT}\right) \\ D^\theta &= D_0^\theta \exp\left(\frac{-Q^\theta}{RT}\right)\end{aligned}$$

ここで, D_0^γ , D_0^α , D_0^θ は pre-exponential factor, Q^γ , Q^α , Q^θ は活性化エネルギーを表す.

2.3.3 線形化平衡状態図

2.3.1 節で述べた局所濃度 C_i と, 2.3.2 節で示した相変態に伴う化学的自由エネルギー変化量 ΔE_{ij} は, Militzer ら⁽¹⁰³⁾ や Mecozzi ら^(104, 105) らに従い, Thermo-Calc. で得られる平衡状態図における各相境界線を線形近似することにより導かれる, 平衡炭素濃度と温度の関係式を用いて算出する. 線形化平衡状態図の模式図を図 2.10 に示す. 図

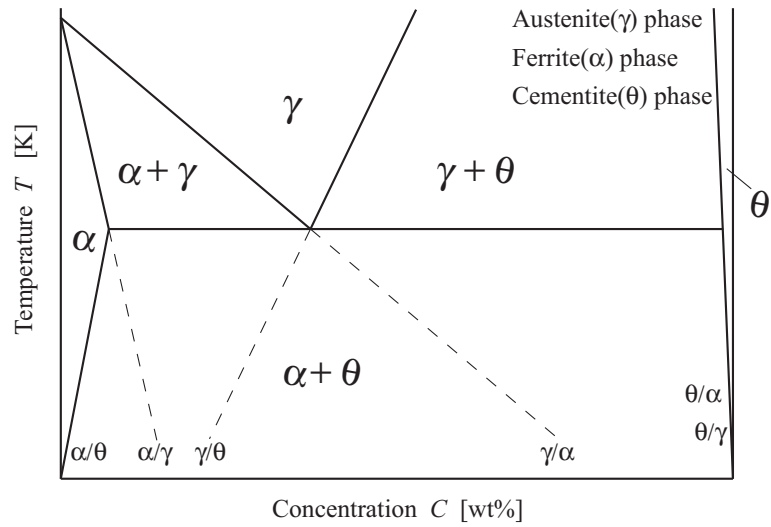


Fig.2.10 Linearized phase diagram.

中, 実線および破線で表される相境界線は, 異相界面におけるそれぞれの相の平衡炭素濃度と温度の関係を示している. 例えば α/γ と記した相境界線は α/γ 界面での α 相の平衡炭素濃度と温度を表している. 本研究では, m 相と n 相 ($m, n = \alpha, \gamma, \theta$) の相境界線を次式に示す平衡炭素濃度と温度の線形関数として表現する.

$$T = \Lambda_{mn}(C_{mn}^{eq} - C_{mn}^R) + T^R \quad (2.118)$$

ここで, γ/α 相境界線の場合は, $C_{\gamma\alpha}^{eq}$ は γ/α 界面での γ 相の平衡炭素濃度を表し, T は系の温度を示している. また, 状態図を線形化する基準温度を T^R , その温度での平衡炭素濃度を基準濃度 $C_{\gamma\alpha}^R$ と表す. $\Lambda_{\gamma\alpha}$ は γ/α 相境界線の傾きである. なお, 本研究で解析対象としている, Fe-C-Mn 合金に対するこれらの各種パラメータは, 第4章および第5章にて示す.

さて, 以下では $N = 3$ で, 粒1が γ 相, 粒2が α 相, 粒3が θ の3相混合組織の場合を考える. このとき, $C_1 \Rightarrow C_\gamma, C_2 \Rightarrow C_\alpha, C_3 \Rightarrow C_\theta$ のように, 粒番号をその結晶粒の相に対応する記号 γ, α, θ に書き換えて表記するものとする. したがって, 式 (2.93) は次式で表される.

$$C = \sum_{i=1}^3 \phi_i C_i = \phi_1 C_\gamma + \phi_2 C_\alpha + \phi_3 C_\theta \quad (2.119)$$

炭素濃度は局所平衡状態を保つように変化していくので, m 相と n 相の界面における炭素濃度の分配比 $\frac{C_m}{C_n}$ が, それぞれの相の平衡炭素濃度の比 (濃度分配係数) k_{mn} と等

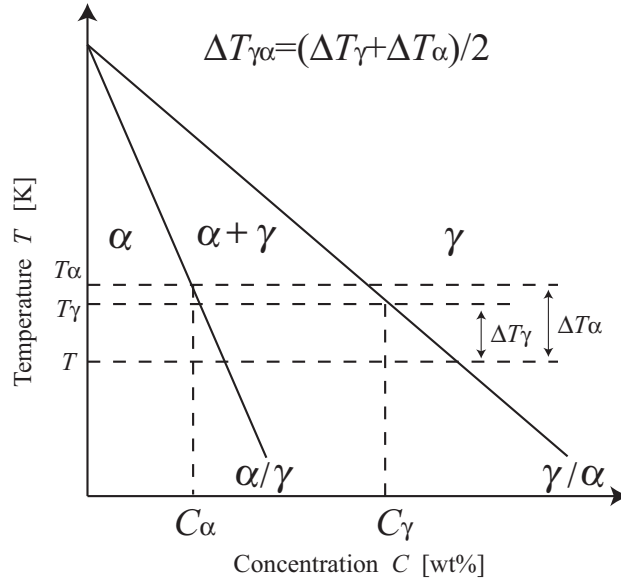


Fig.2.11 Local undercooling.

しい. m/n 界面における濃度分配係数 k_{mn} は次式で表現される⁽¹⁰²⁾.

$$k_{\gamma\alpha} \equiv \frac{C_{\gamma\alpha}^{eq}}{C_{\alpha\gamma}^{eq}} \quad (2.120)$$

$$k_{\gamma\theta} \equiv \frac{C_{\gamma\theta}^{eq}}{C_{\theta\gamma}^{eq}} \quad (2.121)$$

$$k_{\alpha\theta} \equiv \frac{C_{\alpha\theta}^{eq}}{C_{\theta\alpha}^{eq}} \quad (2.122)$$

なお, $k_{mn} = 1/k_{nm}$, $k_{mm} = 1$ である. ここで, 濃度分配係数 $k_{\gamma\alpha}$ は, 界面における α 相の濃度を基準とした γ 相の濃度の比 (C_γ/C_α) を表す.

したがって, 式 (2.120) ~ (2.122) および局所濃度の定義式である式 (2.93) を用いると, 局所濃度 C_i は濃度 C , phase field ϕ_i および濃度分配係数 k_{ij} を用いて次式で与えられる.

$$C_\gamma = \frac{k_{\gamma\gamma}C}{k_{\gamma\gamma}\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} = \frac{C}{\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} \quad (2.123)$$

$$C_\alpha = \frac{k_{\alpha\gamma}C}{k_{\gamma\gamma}\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} = \frac{k_{\alpha\gamma}C}{\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} \quad (2.124)$$

$$C_\theta = \frac{k_{\theta\gamma}C}{k_{\gamma\gamma}\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} = \frac{k_{\theta\gamma}C}{\phi_\gamma + k_{\alpha\gamma}\phi_\alpha + k_{\theta\gamma}\phi_\theta} \quad (2.125)$$

さらに本研究では, 相変態に伴う自由エネルギーの変化量を, 相変態に伴うエントロピーの変化量と局所的な過冷度の積で表現する. すなわち式 (2.113) の自由エネルギー

変化量 ΔE_{ij} は次式のように定義される.

$$\Delta E_{ij} = \Delta S_{ij} \Delta T_{ij} \quad (2.126)$$

ここで, ΔS_{ij} は i 相から j 相への相変態に伴うエントロピー変化量, ΔT_{ij} は粒 i と粒 j の界面における過冷度である. ΔS_{ij} は粒 i と粒 j の相の種類によって決まる.

過冷度 ΔT_{ij} は, γ/α 界面の場合は図 2.11 に示すように求める. すなわち, γ 相側と α 相側の局所濃度 C_γ, C_α に対応する温度 T_γ, T_α を求め, これらと系の温度 T との差 $\Delta T_\gamma, \Delta T_\alpha$ の平均値を過冷度 $\Delta T_{\gamma\alpha}$ とする. したがって, 例えば $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う自由エネルギー変化量 $\Delta E_{\gamma\alpha}$ は, 次式で表現できる.

$$\begin{aligned} \Delta E_{\gamma\alpha} &= \Delta S_{\gamma\alpha} \Delta T_{\gamma\alpha} \\ &= \Delta S_{\gamma\alpha} \frac{\Delta T_\gamma + \Delta T_\alpha}{2} \end{aligned} \quad (2.127)$$

2.4 Micromechanics 理論に基づく Phase-Field 法を用いた無拡散変態モデル

本節では, マルテンサイト相の組織形態を特徴付けるひずみ緩和機構である自己緩和および塑性緩和が生じるマルテンサイト変態を表現可能な Phase-Field モデルを, Micromechanics 理論に基づく Phase-Field Microelasticity 理論を用いて新たに構築する. 本研究では, 立方晶 (母相) から正方晶 (マルテンサイト相) へのマルテンサイト変態をモデル化する.

2.4.1 秩序変数と全自由エネルギー

マルテンサイト変態における結晶構造変化は, 結晶格子のせん断変形で生じ, 図 2.12 に示すように母相の 3 つの $\langle 100 \rangle$ 軸に平行な c 軸を有するマルテンサイト相のバリエントが 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母相において $\phi_i = 0$ となる秩序変数 ϕ_i ($i = 1, 2, 3$) を定義する⁽¹⁰⁶⁾.

このとき, 系の全自由エネルギー G は, 秩序変数を用いて Gibbs の自由エネルギー汎関数として次式のように表される.

$$G = \int_V \left(g_{ch} + g_{el} + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^3 |\nabla \phi_i|^2 \right) dV \quad (2.128)$$

ここで, κ は勾配エネルギー係数である. また, g_{ch} および g_{el} は, それぞれ化学的自由エネルギー密度および弾性ひずみエネルギー密度を表している. 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あることを考慮して, 秩序変数の Landau 多項展開式を用いて, 次式のように表す⁽¹⁰⁷⁾.

$$g_{ch} = \Delta f \left\{ \frac{A}{2} \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 - \frac{B}{3} \sum_{i=1}^3 \phi_i^3 + \frac{C}{4} \left(\sum_{i=1}^3 \phi_i^2 \right)^2 \right\} \quad (2.129)$$

ここで, Δf はマルテンサイト変態に伴う化学的自由エネルギーの変化量を表している. また, A , B および C は Landau 多項展開式の展開係数であり, 本研究では, $A = 0.15$, $B = 3A+12$, $C = 2A+12$ とする⁽¹⁰⁷⁾. このとき, 秩序変数 ϕ_i に対する化学的自由エネルギー密度の変化は, 図 2.13 のように表現される.

マルテンサイト変態においては, 大きな変態ひずみが生じ, それを緩和する過程で組織形態を特徴づけられる. そのため, 変態中の応力場や弾性ひずみエネルギーの変化

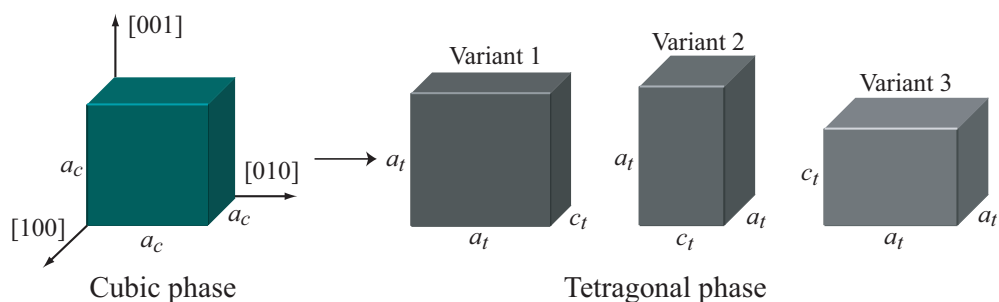


Fig.2.12 Tetragonal variants produced by cubic-tetragonal transformation.

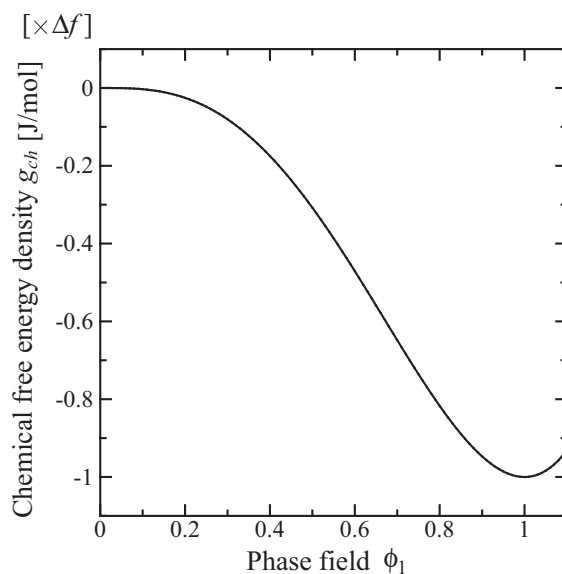


Fig.2.13 Variation of chemical free energy.

を精度良く評価しなければならない。Phase-Field シミュレーションにおける弾性ひずみエネルギーの評価方法としては、有限要素法を用いることもできる⁽⁹⁰⁾が、本研究では、Micromechanics 理論に基づく Phase-Field Microelasticity 理論を用いて評価する^(88, 108)。すなわち、任意形状のマルテンサイト相を含む系の弾性ひずみエネルギー密度は、次式で表現することができる

$$g_{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij}^{el} \epsilon_{kl}^{el} \quad (2.130)$$

ここで、 C_{ijkl} は弾性係数マトリクスである。また、弾性ひずみ ϵ_{ij}^{el} は、全ひずみ ϵ_{ij}^c と

固有ひずみ ϵ_{ij}^0 の差として、次式のように表される。

$$\epsilon_{ij}^{el} = \epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0 \quad (2.131)$$

さらに、全ひずみ ϵ_{ij}^c は次式のように、均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ と不均一ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ の和として表される。

$$\epsilon_{ij}^c = \bar{\epsilon}_{ij}^c + \delta\epsilon_{ij}^c \quad (2.132)$$

均一ひずみは、系の巨視的な変形を表すひずみ量であり、境界条件により決定される。系が自由表面を有しており、外部負荷が作用していない場合には、均一ひずみは固有ひずみの空間平均値として次式のように表される。

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = \frac{1}{V} \int_V \epsilon_{ij}^0 dV \quad (2.133)$$

また、外部負荷が作用せず、系が固定され自由に変形できない場合には、均一ひずみは次式で表される。

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = 0 \quad (2.134)$$

一方、不均一ひずみは、巨視的変形には影響を及ぼさない、均一ひずみからの偏差量として定義される。本研究では、Phase-Field Microelasticity 理論⁽⁸⁸⁾に基づき、平衡方程式をフーリエ変換を用いて解くことにより、不均一ひずみを求める。

式 (2.131) と式 (2.132) を用いると、平衡方程式は次式で表される。

$$\sigma_{ij,j} = C_{ijkl} \left(\bar{\epsilon}_{kl}^c + \delta\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0 \right)_{,j} = 0 \quad (2.135)$$

上式に、不均一ひずみの定義式

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.136)$$

を代入し、整理すると次式が得られる。

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = C_{ijkl} \frac{\partial \epsilon_{kl}^0}{\partial x_j} \quad (2.137)$$

ここで、変位 u_i および固有ひずみ ϵ_{ij}^0 のフーリエ変換式は、

$$u_i = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \hat{u}_i(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k} \quad (2.138)$$

$$\epsilon_{ij}^0 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \hat{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k} \quad (2.139)$$

で表される。ここで、下付き添え字でない i は虚数単位、 \mathbf{k} は逆空間ベクトルを表している。式 (2.138) と式 (2.139) を式 (2.137) に代入し、フーリエ変換の振幅部分を取り出すと次式が成立する。

$$C_{ijkl}k_jk_l\hat{u}_k(\mathbf{k}) = -iC_{ijkl}k_j\hat{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{k}) \quad (2.140)$$

ここで、標記を簡単にするために $G_{ik}^{-1}(\mathbf{k}) = C_{ijkl}k_jk_l$ を定義し、 $\hat{\sigma}_{ij}^0 = C_{ijkl}\hat{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{k})$ を用いれば、変位 u_i のフーリエ変換 $\hat{u}_k(\mathbf{k})$ は次式で表される。

$$\hat{u}_k(\mathbf{k}) = -iG_{ik}(\mathbf{k})k_j\hat{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) \quad (2.141)$$

一方、式 (2.136) の不均一ひずみに、式 (2.138) を代入すれば、次式が成立する。

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{ij}^c &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \frac{i}{2} (k_j\hat{u}_i(\mathbf{k}) + k_i\hat{u}_j(\mathbf{k})) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (2.142)$$

ここで、不均一ひずみのフーリエ変換式より、

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \delta\hat{\epsilon}_{ij}^c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) d\mathbf{k} \quad (2.143)$$

が成立する。したがって、式 (2.142) と式 (2.143) を比較することにより、不均一ひずみのフーリエ変換式の振幅部分 $\delta\hat{\epsilon}_{ij}^c(\mathbf{k})$ は、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \delta\hat{\epsilon}_{ij}^c(\mathbf{k}) &= \frac{i}{2} (k_j\hat{u}_i(\mathbf{k}) + k_i\hat{u}_j(\mathbf{k})) \\ &= \frac{1}{2} \left(-ik_jG_{ki}k_l\hat{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{k}) - ik_iG_{mj}k_n\hat{\sigma}_{mn}^0(\mathbf{k}) \right) \\ &= \frac{1}{2} \{n_j\Omega_{mi}(\mathbf{n}) + n_i\Omega_{mj}(\mathbf{n})\} n_n\hat{\sigma}_{mn}^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.144)$$

ここで、 $\Omega_{ik}(\mathbf{n})$ はグリーン関数テンソルであり、等方弾性体を仮定すると、

$$\Omega_{ik}(\mathbf{n})^{-1} = C_{ijkl}n_jn_l = \left\{ \frac{\delta_{ik}}{\mu} - \frac{n_in_k}{2\mu(1-\nu)} \right\}^{-1} \quad (2.145)$$

で表される。また、 $\mathbf{n} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ は、逆空間の \mathbf{k} 方向の単位ベクトルを表している。以上より、求めるべき実空間における不均一ひずみは、式 (2.144) を逆フーリエ変換することで得ることができる⁽¹⁰⁹⁾。

本研究では、マルテンサイト変態中に生じる塑性変形を再現するために、式 (2.131) の固有ひずみを変態ひずみ ϵ_{ij}^t と塑性ひずみ ϵ_{ij}^p の和として、次式で表現する⁽¹¹⁰⁾。

$$\epsilon_{ij}^0 = \epsilon_{ij}^t + \epsilon_{ij}^p \quad (2.146)$$

ここで、変態ひずみは図 2.12 に示した 3 つのバリエントが生じる際の固有ひずみ $\epsilon_{ij}^{00}(m)$ ($m = 1, 2, 3$) と秩序変数 ϕ_i の線形関数として、次式で表される。

$$\epsilon_{ij}^t = \sum_{m=1}^3 \epsilon_{ij}^{00}(m) \phi_m \quad (2.147)$$

それぞれのバリエントの固有ひずみは、解析領域の x, y, z 方向と母相の $[100]$, $[010]$ および $[001]$ 軸と座標系を一致させると、それぞれ次式の行列形式で表される。

$$\epsilon_{ij}^{00}(1) = \begin{bmatrix} \epsilon_3 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_1 \end{bmatrix} \quad (2.148)$$

$$\epsilon_{ij}^{00}(2) = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_3 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_1 \end{bmatrix} \quad (2.149)$$

$$\epsilon_{ij}^{00}(3) = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{bmatrix} \quad (2.150)$$

ここで、各行列の対角項の値は、図 2.12 より、 $\epsilon_1 = (a_t - a_c)/a_c$ および $\epsilon_3 = (c_t - a_c)/a_c$ で求められる。なお、以上の固有ひずみを Bain ひずみとすれば⁽¹¹¹⁾、本モデルを鉄鋼材料において多く観察される fcc 構造から bct 構造へのマルテンサイト変態に適用可能である。

2.4.2 時間発展方程式

マルテンサイト変態における塑性緩和挙動を表現するためには、変態中の塑性ひずみの時間発展を記述する必要がある。本研究では、弾完全塑性体を仮定し、せん断ひずみエネルギーをポテンシャルとする TDGL 型時間発展方程式で塑性ひずみの時間発展を記述する。すなわち、塑性ひずみの時間発展方程式は、次式で表される⁽¹¹⁰⁾。

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^p}{\partial t} = -K_{ijkl} \frac{\delta G_{el}^{shear}}{\delta \epsilon_{kl}^p} \quad (2.151)$$

ここで、 K_{ijkl} は、塑性ひずみの発展量を規定するカイネティックパラメータであり、本研究では塑性変形による加工硬化が生じない弾完全塑性体を仮定し、 $K_{ijkl} = (KC_{ijkl})^{-1}$ としている^(51, 110)。また、 G_{el}^{shear} はせん断ひずみエネルギーであり、式 (2.130) の弾性ひずみエネルギー密度と同様に次式のように算出される。

$$G_{el}^{shear} = \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} (e_{ij}^c - e_{ij}^0) (e_{kl}^c - e_{kl}^0) dV \quad (2.152)$$

ここで, e_{ij}^c および e_{ij}^0 はそれぞれ, 全ひずみと固有ひずみの偏差成分である. ただし, 式 (2.151) は相当応力 $\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2}\sigma'_{kl}\sigma'_{kl}}$ が次式の Mises 降伏条件を満たし, 塑性変形が生じていると判断された領域でのみ解析を行う.

$$\begin{aligned} F_y &= \bar{\sigma}^2 - \sigma_y^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\{ (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 \right\} \\ &\quad + 3 \left(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2 \right) - \sigma_y^2 = 0 \end{aligned} \quad (2.153)$$

ここで, σ_y は降伏応力である. また, 式 (2.153) をエネルギーで表現すると, 次式のようになる.

$$F_y = G_{el}^{shear} - \frac{\sigma_y^2}{6G} = 0 \quad (2.154)$$

これより, 式 (2.151) は,

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^p}{\partial t} = -K_{ijkl} \frac{\delta F_y}{\delta \epsilon_{kl}^p} = -K_{ijkl} \frac{\delta G_{el}^{shear}}{\delta \epsilon_{kl}^p} \quad (2.155)$$

のように表記することができる⁽¹¹²⁾. さらに, 右辺の汎関数微分を計算すると,

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^p}{\partial t} = -K_{ijkl} \sigma'_{kl} \quad (2.156)$$

で表され, J_2 流れ理論より導かれる塑性ひずみ増分^(113, 114),

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^p}{\partial t} = \dot{\lambda} \frac{\partial F_y}{\partial \sigma_{ij}} = \dot{\lambda} \sigma'_{ij} \quad (2.157)$$

と対応した形式をしていることがわかる. すなわち, 式 (2.151) におけるせん断ひずみエネルギー G_{el}^{shear} は, J_2 流れ理論における塑性ポテンシャル (降伏関数) F_y と対応しており, 本研究で用いる塑性ひずみの発展式 (2.151) は, 式 (2.157) のエネルギー的表現として捉えることができる^(110, 112).

以上より, 式 (2.128) で表される系の全自由エネルギー G が求まるので, マルテンサイト変態によるバリエーションの発展方程式, すなわち ϕ_i の時間発展方程式は次式で表される.

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -L' \frac{\delta G}{\delta \phi_i} = -L' \left(\frac{\partial g_{ch}}{\partial \phi_i} + \frac{\partial g_{el}}{\partial \phi_i} - \kappa \nabla^2 \phi_i \right) \quad (2.158)$$

ここで, L' は, 秩序変数 ϕ_i のカイネティックパラメータである. なお, 数値シミュレーションにおいては, 式 (2.151) と式 (2.158) とを連成して数値解析することにより, 塑性変形が生じるマルテンサイト変態を再現することができる.

2.5 均質化法に基づく弾塑性有限要素法による力学特性評価手法

本節では, Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで予測された微視組織を内部組織に有する鉄鋼材料の力学特性評価を行うために用いる, 均質化法に基づく弾塑性有限要素法について概説する. まず, J_2 流れ理論に基づいて, 大変形を伴う鉄鋼材料の変形挙動を表す弾塑性構成式を導出し, それを用いて弾塑性境界値問題を定義する. ついで, 材料内部の組織形態に依存した微視領域および巨視領域における変形挙動を評価可能とするために, 漸近展開理論に基づく均質化法を適用し, 両スケールにおける変形挙動の支配方程式を導出する. さらに, 有限要素法を用いて支配方程式の離散化を行う.

2.5.1 弾塑性体の構成式と漸近展開理論に基づく均質化法

鉄鋼材料の弾塑性変形挙動を表現する構成式を J_2 流れ理論より導出する. 全ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}$ が, 弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^e$ および塑性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^p$ の和で表されるとすると, 次式のように表される.

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p \quad (2.159)$$

また, Hooke の法則より次式が成立する.

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = \overset{\nabla}{\sigma}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{kk} = D_{ijkl}^e \dot{\epsilon}_{kl} \quad (2.160)$$

ここで, $\overset{\nabla}{S}_{ij}$ および $\overset{\nabla}{\sigma}_{ij}$ は, それぞれ Kirchhoff 応力および Cauchy 応力の Jaumann 速度である. D_{ijkl}^e は等方弾性テンソルである. 式 (2.160) の逆関係より弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^e$, J_2 流れ理論より塑性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^p$ を求め, それらを式 (2.159) に代入すると次式のようなになる (113, 114).

$$\dot{\epsilon}_{ij} = B_{ijkl}^e \dot{\sigma}_{kl} + \frac{9\sigma'_{kl} \dot{\sigma}_{kl}}{4\bar{\sigma}^2 H'} \sigma'_{ij} \quad (2.161)$$

ここで, $B_{ijkl}^e = (D_{ijkl}^e)^{-1}$ は等方コンプライアンステンソル, σ'_{kl} は Cauchy 応力の偏差成分, $\bar{\sigma}$ は相当応力, H' は塑性の接線係数である. 式 (2.161) を式 (2.160) に代入することにより, 本研究で用いる弾塑性構成式が導かれる.

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = \left\{ D_{ijkl}^e - \frac{3G\sigma'_{ij}\sigma'_{kl}}{\bar{\sigma}^2 (H'/3G + 1)} \right\} \dot{\epsilon}_{kl} = D_{ijkl}^p \dot{\epsilon}_{kl} \quad (2.162)$$

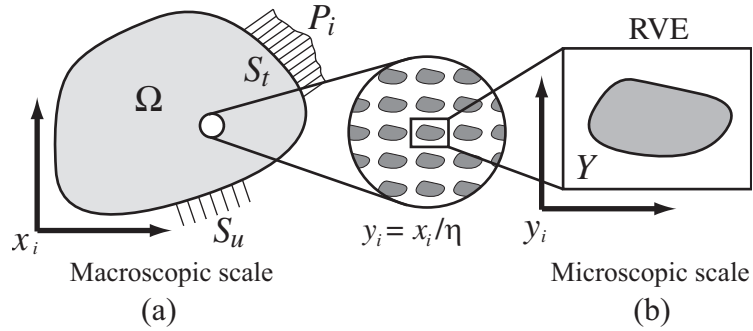


Fig.2.14 Schematic illustration of two-scale boundary value problem.

ここで, G は横弾性係数である.

次に, 図 2.14(a) に示すような系を考える. 現変形状態の物体の体積を Ω , 表面上の一部 S_t 上に作用する表面力を P_i , 残りの表面 S_u には変位速度 v_i が与えられているとすると, この系の弾塑性境界値問題は, 次のように設定することができる

仮想仕事の原理式⁽¹¹⁵⁾

$$\int_{\Omega} (\dot{S}_{ji} + \sigma_{mj} v_{i,m}) \delta v_{i,j} d\Omega = \int_{S_t} \dot{P}_i \delta v_i dS \quad (2.163)$$

境界条件

$$\begin{cases} \dot{P}_i = (\dot{S}_{ji} + \sigma_{mj} v_{i,m}) n_j & \text{on } S_t \\ V_i = v_i & \text{on } S_u \end{cases} \quad (2.164)$$

ひずみ速度-変位速度関係式

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.165)$$

ここで, δv_i は可容変位速度, \dot{S}_{ij} は Kirchhoff 応力の速度であり, \dot{S}_{ij} と式 (2.162) は, 次の関係で表される⁽¹¹⁶⁾.

$$\dot{S}_{ij} = \overset{\nabla}{S}_{ij} - F_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \equiv L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \quad (2.166)$$

次に, 微視組織を有する鉄鋼材料の微視的, 巨視的変形挙動を表現可能にするために, 以上で定義された弾塑性境界値問題に均質化法^(62, 72)を適用する. 図 2.14(a) に示した全体構造の任意点近傍において, 図 2.14(b) に示すような周期性を有し, 全体構造に比べて非常に小さい微視構造を考え, 全体構造の座標系 x_i , 微視構造の座標系 $y_i = x_i/\eta$ の 2 つの座標系を導入する. ここで, η は微視座標系 y_i と巨視座標系 x_i のスケール比

である。このとき、周期性を有する微視構造を代表する最小の構造単位を代表体積要素 (RVE) もしくはユニットセルと呼ぶ。また、座標系 x_i を基準とした場合、与えられた点における微視構造は小さく、物質点と見なせるが、その点の η のオーダー程度で記述されるごく近傍においては、微視構造の不均一性に起因した巨視領域の材料特性が大きく変動する。したがって、変位、ひずみ等の場を記述する関数は、巨視領域の座標系 x_i と微視領域の座標系 y_i の2変数にて表記される関数であると考えられる。また、 x_i と y_i との間にはスケール比 η を介して $y_i = x_i/\eta$ の関係があるので、座標系 y_i により微視構造を記述することは、微視構造を全体構造と同程度の寸法に拡大したものと考えることが可能である。ここで x_i, y_i の2変数により記述された関数は、微視構造と同一の周期を持ち、その周期性を Y-periodic と呼ぶ。

先に示した境界値問題、すなわち式 (2.163) 中の解である変位速度 v_i は、Y-periodic 条件を満足することから、 x_i, y_i の2変数関数として扱い、スケール比 η の漸近展開形式で表すと、次式のようになる。

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, \mathbf{y}) = \eta^0 \mathbf{v}^0(x, \mathbf{y}) + \eta^1 \mathbf{v}^1(x, \mathbf{y}) + \eta^2 \mathbf{v}^2(x, \mathbf{y}) + \dots \quad (2.167)$$

同様に、可容変位速度 δv_i も x_i, y_i の2変数関数として次式のように表される。

$$\delta v_{i,j} = \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} \quad (2.168)$$

式 (2.167) を式 (2.165) に代入すれば、

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \eta^{-1} \dot{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{v}) + \eta^0 \left(\dot{E}_{ij}^0(\mathbf{v}) + \dot{\epsilon}_{ij}^1(\mathbf{v}) \right) + \eta^1 \left(\dot{E}_{ij}^1(\mathbf{v}) + \dot{\epsilon}_{ij}^2(\mathbf{v}) \right) + \eta^2 (\dots) + \dots \quad (2.169)$$

のように、ひずみ速度も η の漸近展開形式で表示できる。ここで、式 (2.169) 中のひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^k(\mathbf{v})$ 及び $\dot{E}_{ij}^k(\mathbf{v})$ は以下のように定義される。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^k(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i^k}{\partial y_j} + \frac{\partial v_j^k}{\partial y_i} \right) \quad (2.170)$$

$$\dot{E}_{ij}^k(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i^k}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j^k}{\partial x_i} \right) \quad (2.171)$$

さらに、式 (2.168) と式 (2.169) を (2.163) に代入し、 $\eta \rightarrow 0$ の極限操作の後、スケール比 η の次数ごとに整理すると、次式が得られる。

$$\frac{1}{\eta^2} \int_{\Omega} \left(L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{v}) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} + \sigma_{mj} \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} \right) dV = 0 \quad (2.172)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\eta} \int_{\Omega} \left\{ L_{ijkl} \left[\left(\dot{E}_{kl}^0(\mathbf{v}) + \dot{\epsilon}_{kl}^1(\mathbf{v}) \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} + \dot{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{v}) \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} \right] \right. \\ & \left. + \sigma_{mj} \left[\left(\frac{\partial v_i^0}{\partial x_m} + \frac{\partial v_i^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} \right] \right\} dV = 0 \end{aligned} \quad (2.173)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\eta^0} \int_{\Omega} \left[L_{ijkl} \left\{ \left(\dot{E}_{kl}^0(\mathbf{v}) + \dot{\epsilon}_{kl}^1(\mathbf{v}) \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} + \left(\dot{E}_{kl}^1(\mathbf{v}) + \dot{\epsilon}_{kl}^2(\mathbf{v}) \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} \right\} \right. \\ & \left. + \sigma_{mj} \left\{ \left(\frac{\partial v_i^0}{\partial x_m} + \frac{\partial v_i^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial v_i^1}{\partial x_m} + \frac{\partial v_i^2}{\partial y_m} \right) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} \right\} \right] d\Omega = \int_{S_t} \dot{P}_i \delta v_i dS \end{aligned} \quad (2.174)$$

一方, Y-periodic 条件を満たす関数 $\Psi(\mathbf{y})$ に対して, 次式の領域積分と表面積分が成立する⁽¹¹⁷⁾.

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{\Omega} \Psi \left(\frac{\mathbf{x}}{\eta} \right) d\Omega \rightarrow \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y \Psi(\mathbf{y}) dY d\Omega \quad (2.175)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \eta \int_S \Psi \left(\frac{\mathbf{x}}{\eta} \right) dS \rightarrow \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_S \Psi(\mathbf{y}) dS d\Omega \quad (2.176)$$

ここで, $|Y|$ は代表体積要素の体積を示す. 式 (2.175) を用いて, 式 (2.172) より, 次式が得られる.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \left\{ \int_Y \left[-\frac{\partial}{\partial y_j} \left(L_{ijkl} \frac{\partial v_k^0}{\partial y_l} + \sigma_{mj} \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \right) \right] \delta v_i dY \right. \\ & \left. + \int_S \left(L_{ijkl} \frac{\partial v_k^0}{\partial y_l} + \sigma_{mj} \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \right) n_j \delta v_i dS \right\} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (2.177)$$

したがって, δv_i は任意であるので, 次式が成立する.

$$-\frac{\partial}{\partial y_j} \left(L_{ijkl} \frac{\partial v_k^0}{\partial y_l} + \sigma_{mj} \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \right) = 0 \quad (2.178)$$

$$\left(L_{ijkl} \frac{\partial v_k^0}{\partial y_l} + \sigma_{mj} \frac{\partial v_i^0}{\partial y_m} \right) = 0 \quad (2.179)$$

ここで, Guedes らの命題⁽⁶²⁾ に従えば,

$$\mathbf{v}^0 = \mathbf{v}^0(\mathbf{x}) \quad (2.180)$$

が成立し, 変位速度の漸近展開式 (2.167) の η^0 の項 \mathbf{v}^0 は, 巨視的な座標系にのみ依存することがわかる.

次に, 式 (2.173) に式 (2.175) と式 (2.176) を適用すると,

$$\int_Y (L_{ijkl} + \sigma_{lj} \delta_{ik}) \frac{\partial v_k^1}{\partial y_l} \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} dY = - \int_Y (L_{ijkl} + \sigma_{lj} \delta_{ik}) \frac{\partial v_k^0}{\partial x_l} \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} dY \quad (2.181)$$

が得られる. この式は, v^0 に対して線形であるので, v^1 と \dot{E}^0 は次式のような関係があることを示している⁽⁶²⁾.

$$\mathbf{v}^1 = \chi \dot{E}^0(\mathbf{v}) \quad (2.182)$$

ここで, χ は特性変位関数と呼ばれる Y -periodic を満足する関数で, 次式の解である.

$$\begin{aligned} \int_Y \left\{ L_{ijpq} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} + \frac{\partial \chi_q^{kl}}{\partial y_p} \right) + \sigma_{qj} \delta_{pi} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right\} \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} dY \\ = \int_Y (L_{ijkl} + \sigma_{lj} \delta_{ki}) \frac{\partial \delta v_i}{\partial y_j} dY \end{aligned} \quad (2.183)$$

さらに, 式 (2.175) において, $\delta \mathbf{v} = \delta \mathbf{v}(\mathbf{x})$ とし, 式 (2.182) を用いると, 巨視的支配方程式 (2.174) は, 次式のようになる.

$$\int_{\Omega} \left[L_{ijkl}^H \dot{E}_{kl}^0 + \tau_{ijkl}^H \frac{\partial v_k^0}{\partial x_l} \right] \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{S_i} \dot{P}_i \delta v_i dS \quad (2.184)$$

$$\left. \begin{aligned} L_{ijkl}^H &= \frac{1}{|Y|} \int_Y \left\{ L_{ijkl} - L_{ijpq} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} + \frac{\partial \chi_q^{kl}}{\partial y_p} \right) \right\} dY, \\ \tau_{ijkl}^H &= \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\sigma_{lj} \delta_{ki} - \sigma_{mj} \frac{\partial \chi_i^{kl}}{\partial y_m} \right) dY, \end{aligned} \right\} \quad (2.185)$$

ここで, 上付き添え字 H のある諸量は, 微視構造の座標系において均質化された量であり, 例えば L_{ijkl}^H は均質化弾性係数マトリクスである. つづいて, ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}$ 及び応力速度 \dot{S}_{ij} が以下に示す漸近展開形

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \eta^{-1} (\dot{\epsilon}_{ij}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \eta^0 (\dot{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \eta^1 (\dot{\epsilon}_{ij}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \eta^2 (\dot{\epsilon}_{ij}^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \dots \quad (2.186)$$

$$\dot{S}_{ij} = \eta^0 (\dot{S}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \eta^1 (\dot{S}_{ij}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \eta^2 (\dot{S}_{ij}^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + \dots \quad (2.187)$$

で表せるとすると, 式 (2.186) と式 (2.182) を式 (2.169) へ代入した式とのスケール比に対する係数比較から, 微視的ひずみ速度が式 (2.188) で表される. 一方, 式 (2.186), (2.187) と構成式 (2.166) より, 微視的応力速度が式 (2.189) のように表される.

$$\dot{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \dot{E}_{ij}^0 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi_i^{kl}}{\partial y_j} + \frac{\partial \chi_j^{kl}}{\partial y_i} \right) \dot{E}_{kl}^0, \quad (2.188)$$

$$\dot{S}_{ij}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = L_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (2.189)$$

また, 微視的変位速度 \mathbf{v}^η は, 式 (2.167) 及び式 (2.182) から, 次のように与えられる.

$$v_i^\eta = v_i^0 + v_i^1 = v_i^0 - \chi_i^{kl} \dot{E}_{kl}^0(\mathbf{v}) \quad (2.190)$$

以上から、微視構造について解くべき特性変位関数 χ は、微視構造の形態と材料定数のみに依存し、全体構造のひずみ、応力等から独立して式 (2.183) を解くことによる求められることが分かる。一方、全体構造について解くべき巨視的平衡方程式 (2.184) は、均質化弾性係数マトリクスなどの均質化された巨視的特性量等が特性変位関数より求められるため、微視構造と独立して求解することが可能となる。

2.5.2 有限要素方程式

本節では、前節において導出された微視的關係式 (2.183) および巨視的平衡式 (2.184) を有限要素法により近似表示する。まず、前節にて導出した微視的關係式 (2.183) のマトリックス表記を以下に示す。

$$\int_Y (\delta \{\dot{\epsilon}\}^T [\mathbf{L}] \{\chi_{,y}\} + \delta \{\mathbf{q}\}^T [\mathbf{Q}] \{\chi_{,y(q)}\}) dY = \int_Y (\delta \{\dot{\epsilon}\}^T [\mathbf{L}] + \delta \{\mathbf{q}\}^T [\mathbf{Q}] [\mathbf{R}]) dY \quad (2.191)$$

ここで、

$$[\mathbf{L}] = [\mathbf{D}^p] - [\mathbf{F}]$$

であり、上式各マトリックスは次のように表せる⁽¹¹⁶⁾。

$$\{\dot{\epsilon}\} = (\dot{\epsilon}_{11} \quad \dot{\epsilon}_{22} \quad \dot{\epsilon}_{33} \quad 2\dot{\epsilon}_{12} \quad 2\dot{\epsilon}_{23} \quad 2\dot{\epsilon}_{31})^T, \quad \{\chi_{,y}\} = (\chi_{,y}^{11} \quad \chi_{,y}^{22} \quad \chi_{,y}^{33} \quad \chi_{,y}^{12} \quad \chi_{,y}^{23} \quad \chi_{,y}^{31}),$$

$$\{\chi_{,y}^{ij}\} = (\chi_{(11)}^{ij} \quad \chi_{(22)}^{ij} \quad \chi_{(33)}^{ij} \quad \chi_{(12)}^{ij} \quad \chi_{(23)}^{ij} \quad \chi_{(31)}^{ij})^T, \quad \chi_{(ij)}^{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi_i^{kl}}{\partial y_j} + \frac{\partial \chi_j^{kl}}{\partial y_i} \right),$$

$$\{\mathbf{q}\} = (v_{1,1} \quad v_{2,2} \quad v_{3,3} \quad v_{1,2} \quad v_{1,3} \quad v_{2,1} \quad v_{2,3} \quad v_{3,1} \quad v_{3,2})^T,$$

$$[\mathbf{Q}] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \sigma_{yy} & 0 & 0 & 0 & \sigma_{yx} & \sigma_{yz} & 0 & 0 \\ & & \sigma_{zz} & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma_{zx} & \sigma_{zy} \\ & & & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \sigma_{zz} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \sigma_{xx} & \sigma_{xz} & 0 & 0 \\ & & & & & & \sigma_{zz} & 0 & 0 \\ & & & & & & & \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ & & & & & & & & \sigma_{yy} \end{bmatrix},$$

$$[\mathbf{R}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{bmatrix}^T,$$

$$\{\boldsymbol{\chi}_{,y(q)}\} = \left(\boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{11} \quad \boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{22} \quad \boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{33} \quad \boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{12} \quad \boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{23} \quad \boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{31} \right),$$

$$\{\boldsymbol{\chi}_{,y(q)}^{ij}\} = \left(\chi_{(11)}^{ij} \quad \chi_{(22)}^{ij} \quad \chi_{(33)}^{ij} \quad \chi_{(12)}^{ij} \quad \chi_{(13)}^{ij} \quad \chi_{(21)}^{ij} \quad \chi_{(23)}^{ij} \quad \chi_{(31)}^{ij} \quad \chi_{(32)}^{ij} \right)^T,$$

$$\{\boldsymbol{v}\} = \left(v_1 \quad v_2 \quad v_3 \right)^T,$$

$$[\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} 2\sigma_{xx} & 0 & 0 & \sigma_{xy} & 0 & \sigma_{xz} \\ & 2\sigma_{yy} & 0 & \sigma_{xy} & \sigma_{zy} & 0 \\ & & 2\sigma_{zz} & 0 & \sigma_{zy} & \sigma_{zx} \\ & & & (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2 & \sigma_{zx}/2 & \sigma_{zy}/2 \\ & sym. & & & (\sigma_{zz} + \sigma_{yy})/2 & \sigma_{xy}/2 \\ & & & & & (\sigma_{xx} + \sigma_{zz})/2 \end{bmatrix}.$$

さらに、要素内の任意の点における変位速度 $\{\boldsymbol{v}\}$ および特性変位関数 $\{\boldsymbol{\chi}\}$ をそれぞれ、要素の節点の変位速度 $\{\boldsymbol{d}\}$ および特性変位 $\{\boldsymbol{\chi}_{(d)}\}$ と形状関数 $[\boldsymbol{\Psi}]$ との線形結合によって、次のように表示する。

$$\{\boldsymbol{v}\} = [\boldsymbol{\Psi}] \{\dot{\boldsymbol{d}}\}, \quad \{\dot{\boldsymbol{d}}\} = \left(\dot{\boldsymbol{d}}_1^T \quad \dot{\boldsymbol{d}}_2^T \quad \cdots \quad \dot{\boldsymbol{d}}_N^T \right)^T, \quad \{\dot{\boldsymbol{d}}_N\}^T = \left(\dot{d}_{N_1} \quad \dot{d}_{N_2} \quad \dot{d}_{N_3} \right),$$

$$\{\boldsymbol{\chi}\} = [\boldsymbol{\Psi}] \{\boldsymbol{\chi}_{(d)}\}, \quad \{\boldsymbol{\chi}\} = \left(\boldsymbol{\chi}^{11} \quad \boldsymbol{\chi}^{22} \quad \boldsymbol{\chi}^{33} \quad \boldsymbol{\chi}^{12} \quad \boldsymbol{\chi}^{23} \quad \boldsymbol{\chi}^{31} \right), \quad \{\boldsymbol{\chi}^{ij}\} = \left(\chi_1^{ij} \quad \chi_2^{ij} \quad \chi_3^{ij} \right),$$

$$\{\boldsymbol{\chi}_{(d)}\} = \left(\boldsymbol{\chi}_{(d)}^{11} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)}^{22} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)}^{33} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)}^{12} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)}^{23} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)}^{31} \right), \quad \{\boldsymbol{\chi}_{(d)}^{ij}\} = \left(\boldsymbol{\chi}_{(d)1}^{ijT} \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)2}^{ijT} \quad \cdots \quad \boldsymbol{\chi}_{(d)N}^{ijT} \right)^T,$$

$$\{\boldsymbol{\chi}_{(d)N}^{ij}\}^T = \left(\chi_{(d)N_1}^{ij} \quad \chi_{(d)N_2}^{ij} \quad \chi_{(d)N_3}^{ij} \right).$$

ここで, $\{\dot{\mathbf{d}}_N\}^T$, $\{\chi_{(d)N}^{ij}\}^T$ はそれぞれ, 要素内 N 番節点の変位速度成分, 特性変位成分である. また, 要素内のひずみ速度 $\{\dot{\epsilon}\}$, 変位速度勾配 $\{\mathbf{q}\}$, 特性変位の偏微分 $\{\chi_{,y}\}$ は節点変位速度 $\{\mathbf{d}\}$ および特性変位 $\{\chi\}$ を用いてそれぞれ次のように表すことができる.

$$\{\dot{\epsilon}\} = [\mathbf{B}] \{\dot{\mathbf{d}}\}, \quad \{\mathbf{q}\} = [\mathbf{E}] \{\dot{\mathbf{d}}\}, \quad \{\chi_{,y}\} = [\mathbf{B}] \{\chi_{(d)}\}, \quad \{\chi_{,y(q)}\} = [\mathbf{E}] \{\chi_{(d)}\} \quad (2.192)$$

ここで, $[\mathbf{B}]$, $[\mathbf{E}]$ はひずみ-節点変位マトリクス, 応力-変位速度マトリクスである⁽¹¹⁶⁾. 式 (2.192) を式 (2.191) に代入することにより, 微視構造における一つの要素に対する微視的方程式が得られ, 次のようになる.

$$\begin{aligned} & \delta \{\dot{\mathbf{d}}\}^T \left[\int_Y ([\mathbf{B}]^T [\mathbf{L}] [\mathbf{B}] \{\chi_{(d)}\} + [\mathbf{E}]^T [\mathbf{Q}] [\mathbf{E}] \{\chi_{(d)}\}) dY \right. \\ & \left. - \int_Y ([\mathbf{B}]^T [\mathbf{L}] + [\mathbf{E}]^T [\mathbf{Q}] [\mathbf{R}]) dY \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.193)$$

このとき, 任意の $\delta \{\dot{\mathbf{d}}\}$ に対し式 (2.193) が成立するためには, 次式が常に成立しなければならない.

$$\left[\int_Y ([\mathbf{B}]^T [\mathbf{L}] [\mathbf{B}] + [\mathbf{E}]^T [\mathbf{Q}] [\mathbf{E}]) dY \right] \{\chi_{(d)}\} = \int_Y ([\mathbf{B}]^T [\mathbf{L}] + [\mathbf{E}]^T [\mathbf{Q}] [\mathbf{R}]) dY \quad (2.194)$$

つづいて, 次式に巨視的平衡式 (2.184) のマトリックス表示式を示す.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (\delta \{\epsilon\}^T [\mathbf{L}^H] \{\epsilon\} + \delta \{\mathbf{q}\}^T [\boldsymbol{\tau}^H] \{\mathbf{q}\}) dV = \int_{S_t} \delta \{\mathbf{v}\}^T \{\dot{\mathbf{P}}\} dS, \\ & [\mathbf{L}^H] = \frac{1}{|Y|} \int_Y ([\mathbf{L}] - [\mathbf{L}] \{\chi_{,y}\}) dV, \\ & [\boldsymbol{\tau}^H] = \frac{1}{|Y|} \int_Y ([\mathbf{Q}] - [\mathbf{Q}] \{\chi_{,y(q)}\}) dV \end{aligned} \quad (2.195)$$

ここで, $\{\dot{\mathbf{P}}\}$, $\{\chi_{,y(g)}\}$ の具体形を以下に示す.

$$\{\dot{\mathbf{P}}\} = \begin{pmatrix} \dot{P}_1 & \dot{P}_2 & \dot{P}_3 \end{pmatrix}^T,$$

$$\{\chi_{,y(g)}\} = \begin{pmatrix} \chi_{,y(q)}^{11} & \chi_{,y(q)}^{22} & \chi_{,y(q)}^{33} & \chi_{,y(q)}^{12} & \chi_{,y(q)}^{13} & \chi_{,y(q)}^{21} & \chi_{,y(q)}^{23} & \chi_{,y(q)}^{31} & \chi_{,y(q)}^{32} \end{pmatrix}$$

また, $\{\chi_{,y(g)}\}$ は節点の特性変位 $\{\chi_{(d)g}\}$ を用いて, 次式で表せる.

$$\{\chi_{,y(g)}\} = [E] \{\chi_{(d)g}\}, \quad \{\chi_{(d)g}\} = \left(\chi_{(d)}^{11} \quad \chi_{(d)}^{22} \quad \chi_{(d)}^{33} \quad \chi_{(d)}^{12} \quad \chi_{(d)}^{13} \quad \chi_{(d)}^{21} \quad \chi_{(d)}^{23} \quad \chi_{(d)}^{31} \quad \chi_{(d)}^{32} \right)$$

次に, 巨視的平衡式 (2.195) に式 (2.192) を代入することにより, 全体構造における一つの要素に対する巨視的平衡式が得られ, 次のようになる.

$$\begin{aligned} \delta \{\dot{d}\}^T \left[\int_Y ([B]^T [L^H] [B] + [E]^T [\tau^H] [E]) dV \{\dot{d}\} - \int_{S_t} [\Psi]^T \{\dot{P}\} dS \right] &= 0, \\ [L^H] &= \frac{1}{|Y|} \int_Y ([L] - [L][B] \{\chi_{(d)}\}) dV, \\ [\tau^H] &= \frac{1}{|Y|} \int_Y ([Q] - [Q][E] \{\chi_{(d)g}\}) dV \end{aligned} \quad (2.196)$$

このとき, 式 (2.196) が任意の $\delta \{d\}$ に対して成立するには, 次式が常に成立する必要がある.

$$\begin{aligned} [K] \{\dot{d}\} &= \{f_t\}, \\ [K] &= \int_{\Omega} ([B]^T [L^H] [B] + [E]^T [\tau^H] [E]) dV, \\ \{f_t\} &= \int_{S_t} [\Psi]^T \{\dot{P}\} dS \end{aligned} \quad (2.197)$$

この式は要素の剛性方程式を表している. これを各要素について求め, 全ての節点について重ね合わせると全体の構造剛性方程式を得ることができる. 得られた構造剛性方程式に境界条件を導入し, 未知節点変位速度と未知節点力速度を決定する. それらからひずみ速度や応力速度などの各量が求められる.

第3章

Fe-C合金におけるフェライト変態挙動と組織形態変化

3.1 緒言

オーステナイト化温度 (A_{e3} 温度) からマルテンサイト変態開始温度 (M_s 温度) までの温度領域で形成される, 最も代表的な変態生成物であるフェライト (α) 相は温度に依存して組織形態が変化し, A_{e3} 温度直下の比較的高温領域では γ 粒界に沿ってポリゴナル状の Allotriomorph (アロトリオモルフ) フェライトの形態を呈する. そして, 過冷度が増加するにつれて α 相は一方向に伸張したラス形状やプレート形状へと組織形態を変化させ, A_{e1} 温度直上の $\alpha + \gamma$ 2相領域では Allotriomorph フェライトの α/γ 界面にフェライトサイドプレートもしくは Widmanstätten (ヴィッドマンステッテン) フェライトと呼ばれる組織が形成される^(118, 119). この Widmanstätten フェライトは, 溶接部の熱影響領域で多く観察される組織で, 材料の靱性に大きく影響するため, その形成機構について長年研究がなされてきた. しかしながら, Allotriomorph フェライトの α/γ 界面や γ 粒界からの連続的な α 相の核形成により支配されるとの見解⁽¹²⁰⁾ や界面の形態不安定性で説明可能であるとする見解⁽¹²¹⁾ などが得られているが, 未だ統一した形成メカニズムは示されていない. そして, 過冷度がより大きくなり A_{e1} 温度以下の温度領域においては, 先に生じた $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態によって炭素濃度が増加した α/γ 界面近傍や γ 母相内部で炭化物であるセメンタイトが析出し, パーライト組織やベイナイト組織が形成される. これらパーライト組織, ベイナイト組織は $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態と θ 析出の競合反応で形成される $\alpha + \theta$ 2相組織であり, このような組織形成過程の予測を行うためにも, α 相の成長やそれに伴う炭素拡散挙動を理解し, 精度良く予測することが必

要である。しかしながら、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態および α 相の形態変化は、温度や界面エネルギーなど多くの因子に影響されている。また、特に変態挙動を大きく支配する炭素原子の拡散は非常に速いため、実験的手法のみで α 相自体の形態変化およびパーライト組織やベイナイト組織形成における α 相形成を理解し、予測することは容易ではない。

そこで本研究では、第2章2節で導出した $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態のPhase-Fieldモデルを用いて、Fe-C合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行い、 α 相の形成過程を予測可能にする。はじめに、一次元空間において $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行い、初析フェライトが生成される温度領域からパーライト、ベイナイト組織が形成される温度領域における、 α 変態機構および α 相形成に伴う炭素拡散挙動の温度、初期炭素濃度依存性について詳細に検討する。ついで、Widmanstättenフェライトの形成シミュレーションを行い、Widmanstättenフェライトの形成過程やその形態に大きく影響を及ぼすと考えられる、界面異方性について検討する。さらに、AllotriomorphフェライトからWidmanstättenフェライトへの α 相の形態変化を数値シミュレーションにより再現することで、Widmanstättenフェライトの形成メカニズムについて考察する。

3.2 解析モデルおよび解析条件

図3.1に、一次元空間における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションで用いる解析モデルおよび初期条件を示す。ここでは、粒径 $0.5\mu\text{m}$ の γ 粒界に核形成した α 相が γ 粒内へ成長する過程を想定し、周期性を考慮して解析領域の大きさを $0.25\mu\text{m}$ とする。また、解析領域の両端において零ノイマン条件を考慮し、解析領域左端に幅 2nm の初期 α 相を想定してphase field ϕ の初期分布を配置する。各相の初期炭素濃度は、 α 相においては平衡組成、 γ 相では過飽和状態とし、界面領域においてステップ状に変化させる。平衡組成は α 、 γ 単相の化学的自由エネルギー $G^\alpha(u_c, T)$ と $G^\gamma(u_c, T)$ の共通接線則から算出する。そして、等温変態を想定し、その保持温度および γ 相の初期炭素濃度を種々に変化させることによって、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の温度・初期炭素濃度依存性を調査する。

なお、Phase-Field法を用いた組織形成シミュレーションにおいて、解析結果の定量的評価を可能にするためには、界面幅 δ を実際の界面厚さに近い値である $0.5\text{nm} \sim 1.5\text{nm}$ に設定する必要がある⁽⁸⁹⁾。そこで、本シミュレーションでは解析領域内に2000点の格子点を配置し、格子点間隔を $\Delta x = 1.25 \times 10^{-1}\text{nm}$ として、界面幅を $\delta = 8\Delta x = 1.0\text{nm}$ とする。またFe-C合金のモル体積 v_m を $v_m = 7.0 \times 10^{-6}\text{m}^3/\text{mol}$ とする。界面エネル

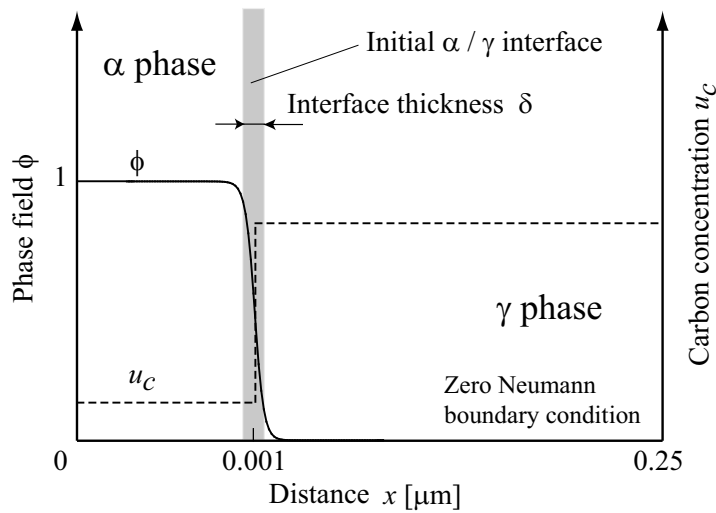


Fig.3.1 Simulation model and initial condition for $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation.

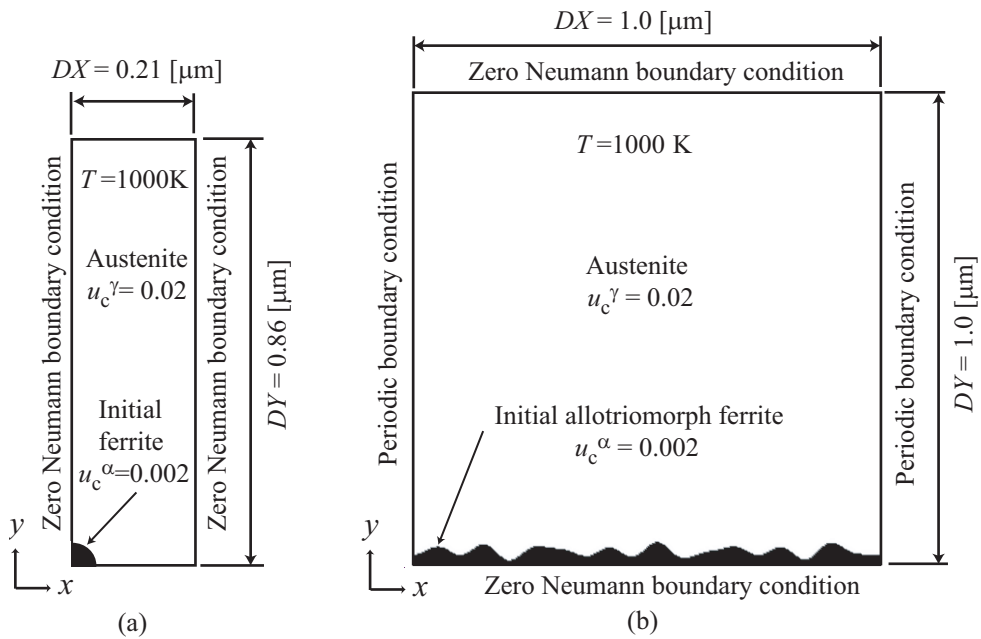


Fig.3.2 Simulation model and initial condition for growth of (a) a single Widmanstätten ferrite and (b) Widmanstätten ferrite plates from Allotriomorph ferrite.

ギーは非整合界面を想定して $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 一定とする⁽¹²²⁾。

次に、図 3.2(a) に単一の Widmanstätten フェライト形成過程の数値シミュレーションで用いる解析モデル、初期条件および境界条件を示す。2次元解析では、数値解析の

効率化のためにアダプティブ法⁽⁴²⁾を用いている(付録F参照)。したがって、 $DX \times DY = 0.21 \times 0.86 \mu\text{m}$ の解析領域を、アダプティブメッシュの最大要素を用いて 2×8 の要素分割する。ここで、アダプティブメッシュの要素サイズのレベル数は6とし、最小要素と最大要素のサイズ比は1:32である。このとき、界面領域においては最小有限要素サイズ $\Delta x = \Delta y = 3.3 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ としている。また、解析領域の原点位置に半径 $r = 3\text{nm}$ の円形の初期 α 相を配置し、優先成長方向を $\theta_0 = 90^\circ$ とする。これに合わせてphase field ϕ の初期分布を界面領域で滑らかに変化するように与える。このとき、界面幅 $\delta = 6\Delta x = 20\text{nm}$ としている。

また、本解析では変態温度 $T = 1000\text{K}$ 一定の等温変態を想定し、各相の初期炭素濃度は、初期 α 相においては平衡組成、 γ 相においては α 相の平衡組成に対して過飽和状態 $u_c = 0.02$ とする。解析領域端の境界条件はphase field ϕ 、炭素濃度 u_c ともに全解析領域端で零ノイマン条件とする。

次に、 γ 粒界に沿って形成された粒界 Allotriomorph フェライトから、複数の Widmanstätten フェライトが形成される過程をシミュレートするために用いる解析モデル、初期条件および境界条件を図3.2(b)に示す。ここでは、解析領域は $DX = DY = 1.0 \mu\text{m}$ の正方形領域とし、アダプティブメッシュの最大要素を用いて 10×10 の要素分割を行う。アダプティブメッシュの要素サイズのレベル数とメッシュサイズおよび変態温度、各相の初期炭素濃度は図3.2(a)の場合と同様である。初期 α 相に関しては、Allotriomorph フェライトを想定して解析領域の x 軸上に配置し、 α 相の優先成長方向を $\theta_0 = 70^\circ$ とする。したがって、本解析モデルにおいては解析領域端の境界条件として、左右端面では周期境界条件、上下端面では零ノイマン条件としている。

Allotriomorph フェライトの初期形態が Widmanstätten フェライトの形態、形成過程に及ぼす影響を検討するため、初期 α 相の形態を次式に示すような関数を用いて定義し、初期 α/γ 界面に初期不整を与える。

$$h(x) = h_0 + \sum_{i=1}^M a_i \sin\left(\frac{2\pi N_i}{DX} x + \psi_i\right), \quad (3.1)$$

ここで、 $h(x)$ は x 軸から初期界面までの y 軸方向距離、 i ($i = 1, 2, \dots, M$)は初期不整を与えるための正弦関数の数を表し、 h_0 、 a_i 、 N_i および ψ_i はそれぞれ、 y 軸から初期界面までの平均距離、正弦関数の振幅、 x 軸上にある各正弦関数の波数および初期位相である。なお、本研究では次の値を用いて初期界面形状を与えている； $M = 3$ 、 $h_0 = 33 \text{ nm}$ 、 $a_1 = a_3 = 6.6 \text{ nm}$ 、 $a_2 = 9.9 \text{ nm}$ 、 $\psi_1 = \pi/2$ 、 $\psi_2 = 0$ and $\psi_3 = 3\pi/5$ 。

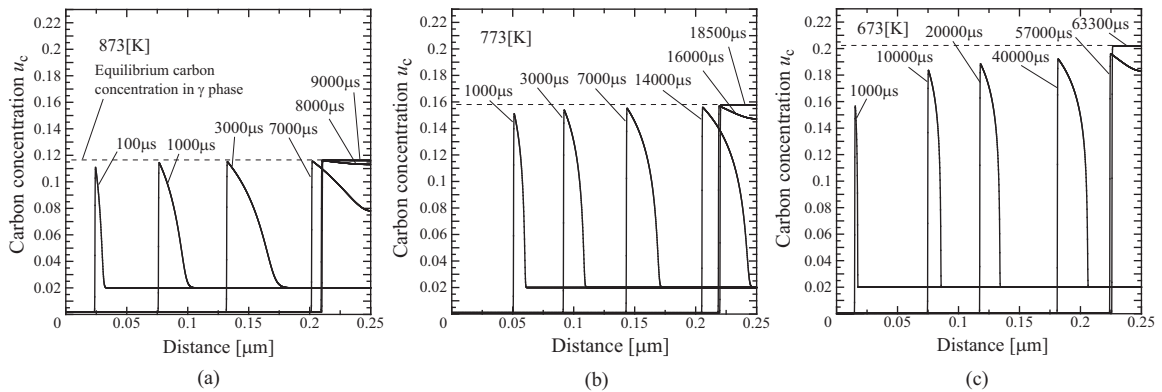


Fig.3.3 Evolution of ferrite phase and carbon concentration profiles at temperature (a) $T=873\text{K}$, (b) $T=773\text{K}$ and (c) $T=673\text{K}$.

3.3 Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態と炭素拡散挙動

3.3.1 フェライト相の成長と炭素拡散挙動の温度依存性

本節では、 Ae_3 温度以下の広範な温度領域における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う、炭素拡散挙動と α 相の成長及ぼす保持温度の影響について検討する。ここでは、母相である γ 相の初期炭素濃度は α 相の平衡組成に対し過飽和状態の $u_c = 0.02$ で一定としている。

はじめに、Widmanstätten フェライト相が生成する Ae_1 温度直上の温度領域^(123, 124, 125)を想定し、温度 $T = 873\text{K}$ としてシミュレーションを行った。図 3.3(a) に、 α 相の成長に伴う炭素濃度分布の時間発展を示す。 α 相が γ 相側へと成長するにつれ、新たに生成された α 相の最大固溶限を超える炭素原子は母相の γ 相へと拡散する。 γ 相の炭素固溶度は α 相に比べて大きい、炭素原子の拡散係数は極めて小さい。したがって、図 3.4 に示すように界面領域内で炭素濃度は増加し、界面付近の γ 相において炭素原子が偏析していることがわかる。そして、等温保持後 $7000\mu\text{s}$ では、界面前方の炭素拡散領域が対称領域の γ 相粒界から成長する α 相の炭素拡散領域と衝突し、互いの α 相の成長を抑制するソフトインピンジメント⁽¹²⁾を生じている。これにより γ 相内の炭素濃度は増加し、 α/γ 界面の移動は極端に抑制され、 γ 相内の炭素濃度が平衡組成で一定となると、 α 相の成長が停滞していることがわかる。

次に、パーライト組織と上部ベイナイト組織が生成する温度領域^(126, 127)を想定し、温度 $T = 773\text{K}$ と $T = 673\text{K}$ としたシミュレーション結果を図 3.3(b) と図 3.3(c) に

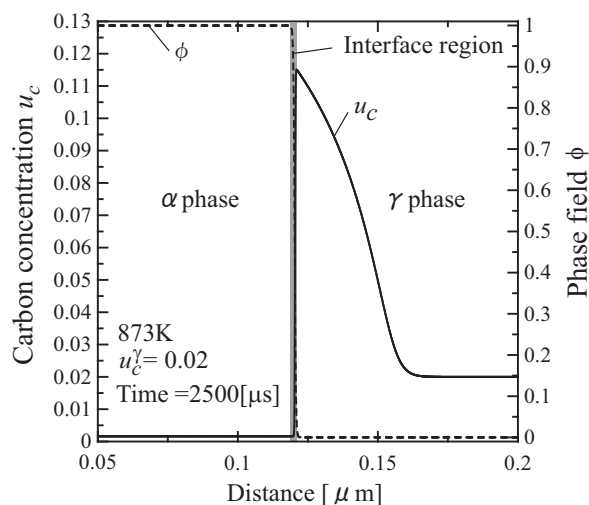


Fig.3.4 Distributions of phase field and carbon concentration at $2500\mu s$ and $T=873K$. Initial carbon concentration in austenite is set to be $u_c = 0.02$.

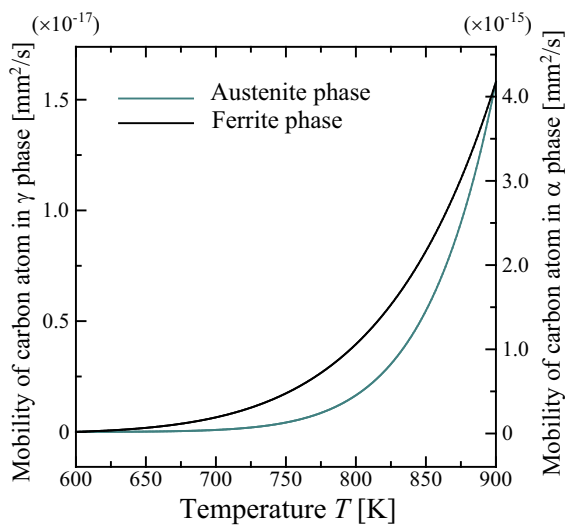


Fig.3.5 Temperature dependency of mobility of carbon atom in austenite and ferrite phase at $u_c = 0.02$.

示す。γ相の界面近傍における炭素濃度と炭素偏析量の変化は $T = 873 K$ の場合と同様の挙動を示すが、 α/γ 界面の易動度は温度の低下により減少するため、 α 相の成長は温度低下に伴って遅くなっていることがわかる。また、図3.5に示すようにγ相における炭素原子の易動度は、温度の低下に伴って急激に減少するため、γ相の界面での炭素濃度の増加量より大きく、狭い範囲で炭素原子が偏析していることがわかる。このよう

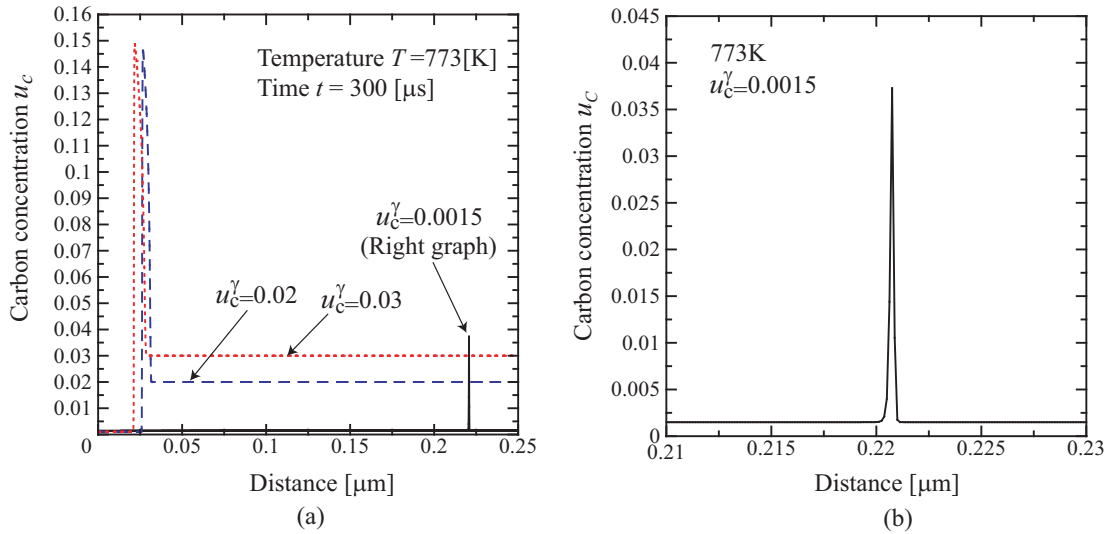


Fig.3.6 Effect of initial carbon concentration in austenite phase (a) on the transformation behavior at temperature $T = 773\text{K}$ and time $300\mu\text{s}$. (b) Interface-controlled growth in $u_c = 0.015$.

な温度の低下による炭素濃度分布の変化は、 θ の析出、先に述べたソフトインピンジメントの発生および Solute drag 効果の発現に直接関係する。したがって、以上の結果のように Phase-Field 法を用いた本シミュレーションによって、 α 相を含む組織形成予測を行ううえで重要な、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う炭素拡散挙動の温度依存性が再現可能であることが示された。さらに、図 3.3 中の破線は γ 相の平衡組成を表しているが、温度低下により α/γ 界面前方において急激に炭素濃度が増大するが、界面の移動中はその値は平衡組成よりも小さく、両相の炭素濃度は界面において局所平衡状態を保たないことが示唆される。このことから、Phase-Field 法を用いた本研究のシミュレーション結果は、Krielaart らが界面移動と炭素拡散を考慮した Mixed-mode model を用いて得た解析結果⁽⁷⁵⁾ を裏付けるものであると考えられる。

3.3.2 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態機構の初期炭素濃度依存性

次に、本節では γ 相の初期炭素濃度が $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態機構に与える影響を評価する。図 3.6(a) に温度 $T = 773\text{K}$ 、 γ 相の初期炭素濃度 $u_c^\gamma = 0.0015, 0.02$ および 0.03 における、等温保持後 $300\mu\text{s}$ での炭素濃度分布を示す。 γ 相の初期炭素濃度の減少により、過飽和度すなわち駆動力が増加するので、 α 相の成長速度は増加している。初期濃度 $u_c^\gamma = 0.02$ と 0.03 の場合には、 α 相の成長は炭素の拡散で律速されているが、 $u_c^\gamma = 0.0015$ の

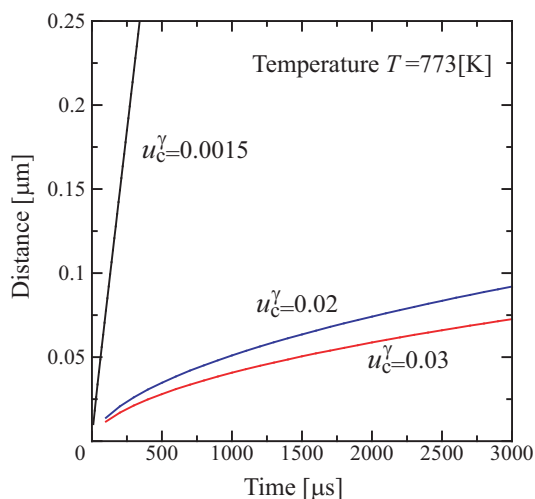


Fig.3.7 Time evolution of interface position at 773K. Initial carbon concentrations are 0.02, 0.03 and 0.0015.

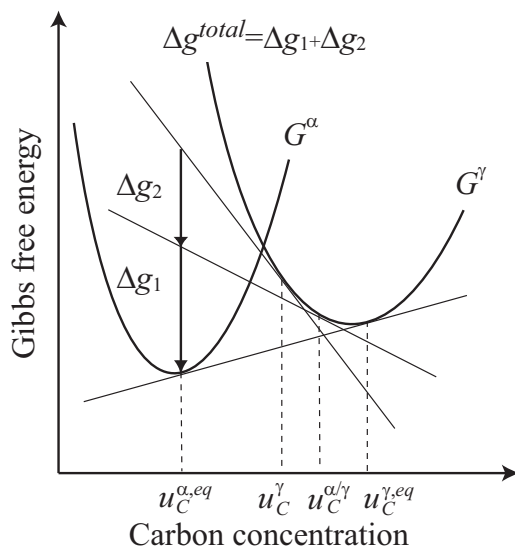


Fig.3.8 Illustration of dissipation of Gibbs free energy by interfacial migration Δg_1 and carbon diffusion Δg_2 .

場合は、界面移動が速く炭素拡散が追従できなくなり、図 3.6(b) に示すような一定の高さを有するスパイク状の炭素濃度分布を形成して α 相が成長している。このとき、 γ 相で炭素偏析は生じておらず、 α 相の生成に組成の変化を伴わないマッシュ変態になることがわかる。さらに、図 3.7 に各初期炭素濃度における α/γ 界面位置の時間変化を示す。 $u_C^\gamma=0.02$ と 0.03 における α 相の成長は、炭素原子の偏析を伴うため、時間とともに

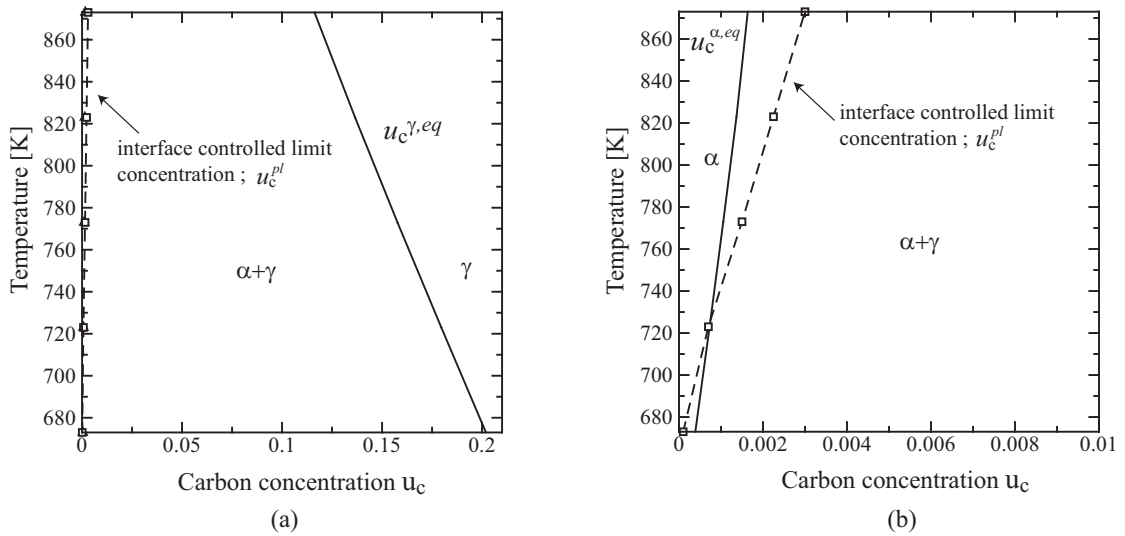


Fig.3.9 Equilibrium phase diagram in temperature range from 873K to 673K.

抑制されるが、 $u_c^\gamma=0.0015$ では γ 相への炭素原子の偏析を伴わないため、 α 相はほぼ一定の速度で速く成長することがわかる。

このような γ 相の初期炭素濃度の変化による変態挙動の違いを、図 3.8 に示す $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態における化学的自由エネルギー変化の模式図を用いて考察する⁽¹²²⁾。 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の化学的全自由エネルギー変化は、界面の移動で消費される化学的自由エネルギー変化 Δg_1 と炭素原子の長距離拡散で消費される化学的自由エネルギー Δg_2 の和であり、図 3.8 の Δg^{total} で表される。 γ 相の初期炭素濃度 u_c^γ の減少は、 Δg^{total} の増加をもたらすため α 相の成長を促進する。 さらに、前節で述べた変態の進行に伴う γ 相の界面における炭素濃度 $u_c^{\alpha/\gamma}$ が減少すると相対的に界面移動の駆動力 Δg_1 は増加し、 Δg_2 は減少するので、 α 相の成長はさらに促進する。 また、 u_c^γ の減少により Δg_1 が増加するにつれて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態は炭素拡散律速変態⁽¹²⁸⁾ から界面律速変態⁽¹²⁹⁾ の性質を呈するようになる。 したがって、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態は拡散律速変態と界面律速変態の両方の性質を有し、温度と濃度に依存して界面の移動と炭素拡散のバランスが変化することで、変態挙動が変化することがわかる。

さらに、 $T = 873 \text{ K}$ から $T = 673 \text{ K}$ の温度領域において γ 相に、様々な初期濃度を与えて解析を行い、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態が拡散律速から界面律速に移行する濃度 u_c^{pl} をプロットした平衡状態図を図 3.9(a) に示す。 図中の破線が u_c^{pl} を示している。 解析を行った温度領域では、 u_c^{pl} は $\alpha/\alpha + \gamma$ 境界付近の低い炭素濃度となることがわかる。 図 3.9(a) の炭素濃度 $u_c \leq 0.01$ の領域を図 3.9(b) に拡大して示す。 温度が低下するほど界面の易動

度が非常に小さくなり、 γ 相の界面における炭素濃度が増加するため、さきに説明した Δg_2 の増加をもたらす。したがって、界面移動のためにより大きな自由エネルギー変化を必要とするので、 u_c^{pl} は温度の低下に伴い α 相の平衡組成に接近する。さらに、723K以下では u_c^{pl} は α 単相領域に存在し、 $\alpha + \gamma$ 相領域ではマッシュ変態が発生しないことが示唆される。

3.4 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態によるWidmanstättenフェライトの形成

3.4.1 単一のWidmanstättenフェライト形成過程に及ぼす界面異方性の影響

本節では、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による単一のWidmanstättenフェライト形成過程の数値シミュレーションを実施し、Widmanstättenフェライトの成長や形態に及ぼす界面エネルギーの大きさおよび異方性の影響について詳細に検討する。

はじめに、修正勾配エネルギー係数の式(2.33)と式(2.34)において、界面エネルギー $\sigma = 0.6\text{J/m}^2$ 、異方性モード $k = 2$ 、異方性強度 $\xi = 0.6$ を用いて、シミュレーションを行ったときの α 相形態と炭素濃度分布の時間変化を図3.10に示す。図3.10中の炭素濃度が低い白色領域が α 相であり、円形の初期形状を有する α 相は、系全体のエネルギーを減少させるように形態を変化させ、時間の経過とともに界面エネルギーの大きい $\theta = 90^\circ$ 方向への成長が速くなり、プレート形状の α 相すなわちWidmanstättenフェライトを形成していることがわかる。このとき、 α/γ 界面の界面エネルギーは $\theta = 90^\circ$ 方向で最大値 0.83J/m^2 、 $\theta = 0^\circ$ 方向で最小値 0.24J/m^2 となる。これは、それぞれ非整合界面および部分整合界面に対応する界面エネルギー値に対応している⁽¹³⁰⁾。また、Widmanstättenフェライトは成長初期段階から、強い界面異方性により実験で観察されるような鋭いチップ形状を有している^(125, 126)。本研究では界面異方性を表現する勾配エネルギー係数に対して、修正勾配エネルギー係数を適用したため、実験で観察されるような、鋭い先端形状を有するWidmanstättenフェライトの組織形態を再現可能である⁽¹³¹⁾。

前節で示したように、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α 相の生成過程においては、新たに生成した α 相の最大固溶限を超える炭素原子は炭素固溶度の大きい母相の γ 相へと拡散し、 α/γ 界面前方の γ 相で炭素原子が偏析している。界面エネルギーが最小となる $\theta = 0^\circ$ 方向

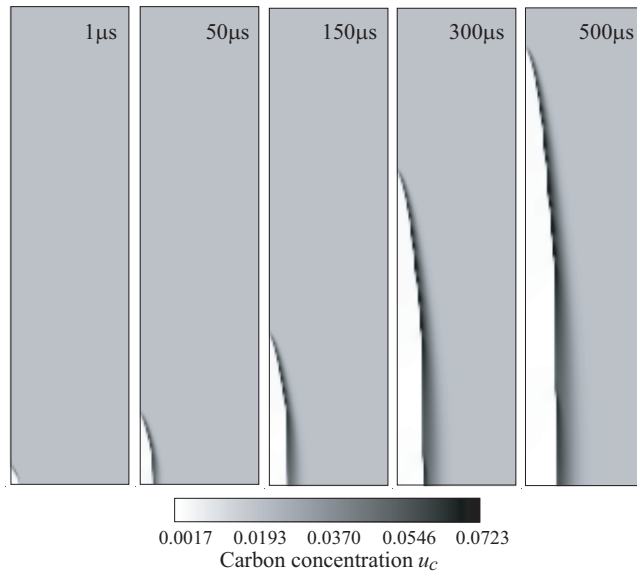


Fig.3.10 Growth of Widmanstätten ferrite with $\sigma = 0.6 \text{ J/m}^2$, $\xi = 0.6$ and $\delta = 20\text{nm}$

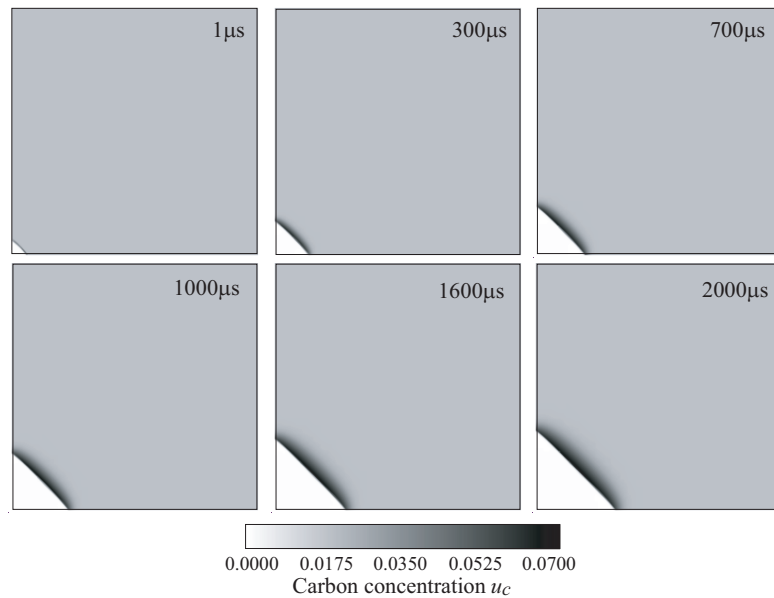


Fig.3.11 Growth of ferrite phase with $k = 4$, $\sigma=1.0 \text{ J/m}^2$ and $\xi = 0.3$.

では、界面移動が遅いために、炭素の拡散が界面移動に追従でき界面前方の γ 相で炭素原子が堆積しやすい。これにより界面移動がさらに抑制される。一方、界面エネルギーが最大となる $\theta = 90^\circ$ 方向では、界面の移動速度が大きくなり界面前方の炭素原子の偏析量が減少する。すなわち、界面エネルギーの異方性により、各方向への界面移動速度

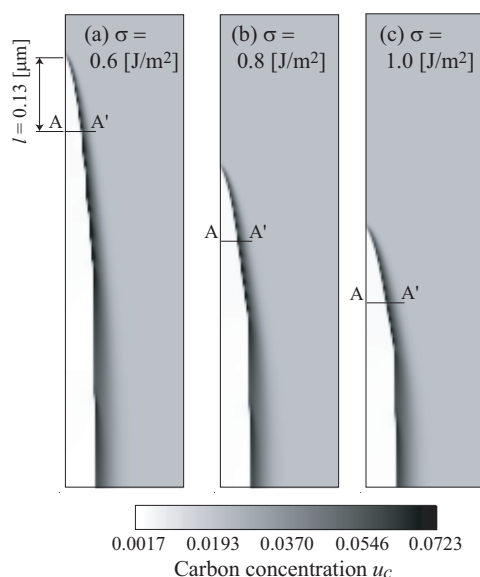


Fig.3.12 Effects of interfacial energy on growth of Widmanstätten ferrite for (a) $\sigma = 0.6$, (b) $\sigma = 0.8$ and (c) $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ at $500\mu\text{s}$.

が変化することに応じて、炭素原子の堆積量が大きく変化し、これが α 相がプレート状に成長する一つの要因になっていると考えられる。

さらに本研究では、Fe系合金は立方晶であるため異方性モード数 $k = 4$ を用いるのが一般的であることから、異方性モード $k = 4$ を用いて同様の条件でシミュレーションを行った。しかしながら、図3.11に示すように、 $k = 2$ の場合に比べて鋭い先端形状が形成されず、どの方向の α/γ 界面近傍において炭素原子が多く堆積したため、プレート状 α 相へと成長しなかった。したがって、Widmanstättenフェライトのようなプレート状 α 相の成長過程においては、鋭い先端形状を形成するような強い界面異方性が必要であることが示唆される。

次に、Widmanstättenフェライトの成長速度に及ぼす界面エネルギーの大きさの影響を評価する。図3.12に界面エネルギー $\sigma = 0.4, 0.8$ および 1.0 J/m^2 における、 $500\mu\text{s}$ でのWidmanstättenフェライトの形態と炭素濃度分布を示す。また、図3.13(a)に各界面エネルギーにおけるチップ先端位置の時間変化を示す。一定の異方性強度における、界面エネルギーの増加は、系全体のエネルギーの増大をもたらすが、図3.12と図3.13(a)より、界面エネルギーが大きくなるほど、優先成長方向への成長は抑制されることがわかる。これは、合金の過冷却凝固などの解析結果とは相反する結果である。このような現象を説明するために、各界面エネルギーにおいて、図3.12に示すようなチップ先端位

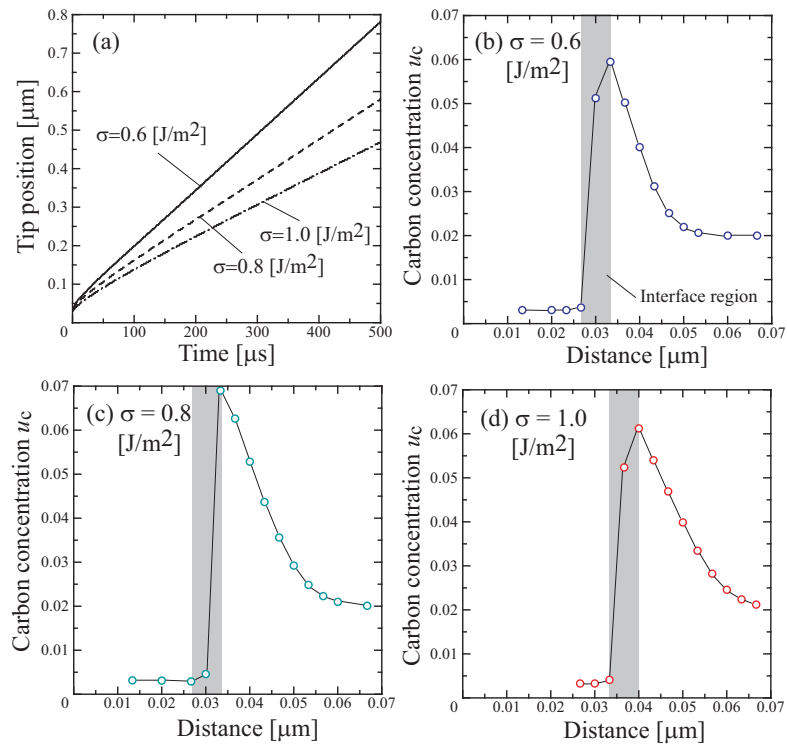


Fig.3.13 Effects of interfacial energy (a) on tip velocity and distribution of carbon concentration for (b) $\sigma = 0.6$, (c) $\sigma = 0.8$ and (d) $\sigma = 1.0$ J/m² at 500 μ s.

置から距離 $l = 0.13 \mu\text{m}$ 離れた A-A' 断面の炭素濃度分布を、それぞれ図 3.13(b) ~ (d) に示す。 α/γ 界面付近の炭素濃度分布は同様であるが、界面エネルギーが増加するほど、 α 相は $\theta = 0^\circ$ 方向への成長を促進していることがわかる。すなわち、界面エネルギーの増加により、系の自由エネルギーは増大するが、界面エネルギーの大きな優先成長方向への成長は抑制されるのは、チップ付近で $\theta = 0^\circ$ 方向への成長が促進することで系のエネルギーを減少させるためであることがわかる。

さらに、界面エネルギーの異方性の強さが Widmanstätten フェライトの成長速度に及ぼす影響を検討する。図 3.14 に異方性強度 $\xi = 0.3 \sim 0.6$ の場合において、 y 軸方向の長さが $0.5 \mu\text{m}$ まで成長した Widmanstätten フェライト相の形態と炭素濃度分布、および y 軸上の炭素濃度プロファイルを示す。ここでは、 $\theta = 0^\circ$ 方向の界面エネルギーが 0.25 J/m^2 で一定となるように σ を設定している。異方性強度が大きくなるにつれて、チップ先端形状は鋭くなることがわかる。また、異方性強度の増加に伴って界面の移動速度が大きくなるため、図 3.14 に示すように、チップ先端の γ 相における炭素原子の堆積が抑制される。図 3.15 に各異方性強度におけるプレート先端位置の時間変化を示す。

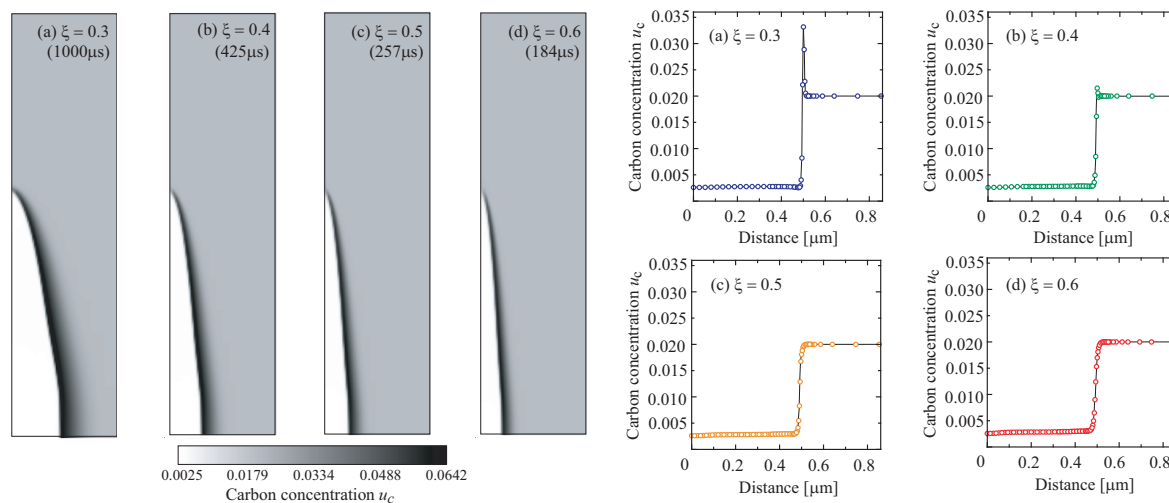


Fig.3.14 Effects of strength of anisotropy on growth of Widmanstätten ferrite and carbon concentration profile along y axis for (a) $\xi = 0.3$, (b) $\xi = 0.4$, (c) $\xi = 0.5$ and (d) $\xi = 0.6$.

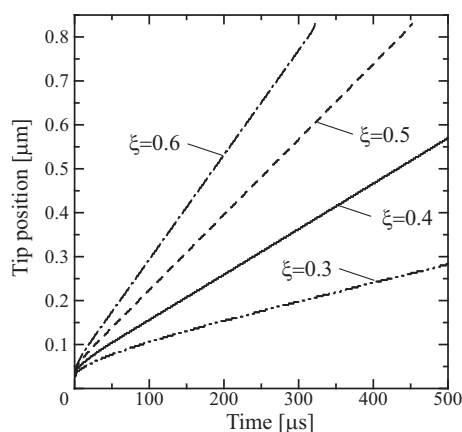


Fig.3.15 Effects of strength of anisotropy on tip velocity.

異方性強度が増大するにつれて、チップ近傍の界面エネルギーが大きくなるため、優先成長方向の成長速度は増加し、特に、 $\xi = 0.5$ や 0.6 の場合にはチップ先端の γ 相において炭素濃度が増大せず、非常に大きな成長速度を示すことがわかる。

以上の結果より、異方性強度の増大によりチップ近傍の界面エネルギーが $\theta = 0^\circ$ 方向に比べてより大きくなるため、優先成長方向への成長速度は増大し、より鋭いチップ形状を形成することが示唆される。

3.4.2 Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトへの組織形態変化

本節では、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により γ 粒界に生成された、Allotriomorph フェライトから複数の Widmanstätten フェライトプレートが形成する組織形態変化をシミュレートし、Widmanstätten フェライトプレートの形成メカニズムを明らかにする。

図 3.16(a)(b)(c) に、それぞれ異方性強度 $\xi = 0.6, 0.4$ および 0.3 における α 相の形成過程を炭素濃度分布の時間変化で示す。ここで、界面エネルギーは $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 一定であり、Allotriomorph フェライトの初期形態は $N_1 = 5, N_2 = 8, N_3 = 11$ を用いて、比較的短い波長の初期界面形状になるように設定している。

異方性強度 $\xi = 0.6$ の場合、界面エネルギーの強い異方性により、初期 Allotriomorph フェライトの形態は組織全体の界面エネルギーが減少するように変化し、初期 α/γ 界面に鋭い先端形状を有する多数の小さなプレートのチップ部分が形成される ($2 \sim 20 \mu\text{s}$)。さらに変態が進行するに伴って、隣り合うチップ同士は融合を繰り返しながら競合的に成長するため、チップ数は減少する ($20 \sim 100 \mu\text{s}$)。その後、初期 Allotriomorph フェライトの凸状箇所形成されたチップが、界面の形態不安定性によって周囲のチップよりも優先的に成長し、Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトプレートへとその形態を変化させていることがわかる ($100 \sim 400 \mu\text{s}$)。そして、変態後期においては各プレートは定常成長し、Widmanstätten フェライトは優先成長方向に更に成長を続ける。このとき、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態が進行するにつれて α 相から γ 相へと炭素が拡散するため、Widmanstätten プレートに挟まれた γ 相においては炭素濃度が増加し、未変態のまま γ 相が残留していることがわかる ($400 \sim 1000 \mu\text{s}$)。

一方、異方性強度 $\xi = 0.4$ の場合、 α 相は $\xi = 0.6$ における解析結果で観察されたように、初期 Allotriomorph フェライトの凸状箇所に優先的に成長しているが、異方性強度の減少によりプレート側面方向への成長が促進されるため、プレート成長方向前方に炭素原子が堆積し、Widmanstätten フェライトプレートの成長が大きく抑制されていることが分かる。さらに、異方性強度 $\xi = 0.3$ においては、Widmanstätten フェライトは形成されず、Allotriomorph フェライトの形態のまま成長していることがわかる。

次に、Allotriomorph フェライトの初期形態が Widmanstätten フェライトの組織形態に及ぼす影響について検討する。図 3.17 に、異方性強度 $\xi = 0.6$ における Widmanstätten フェライトプレートの形成過程および形態変化を炭素濃度分布の時間変化で示す。式 (3.1) において $N_1 = 2, N_2 = 4, N_3 = 3$ を用いており、図 3.16 で示した結果の初期 α/γ

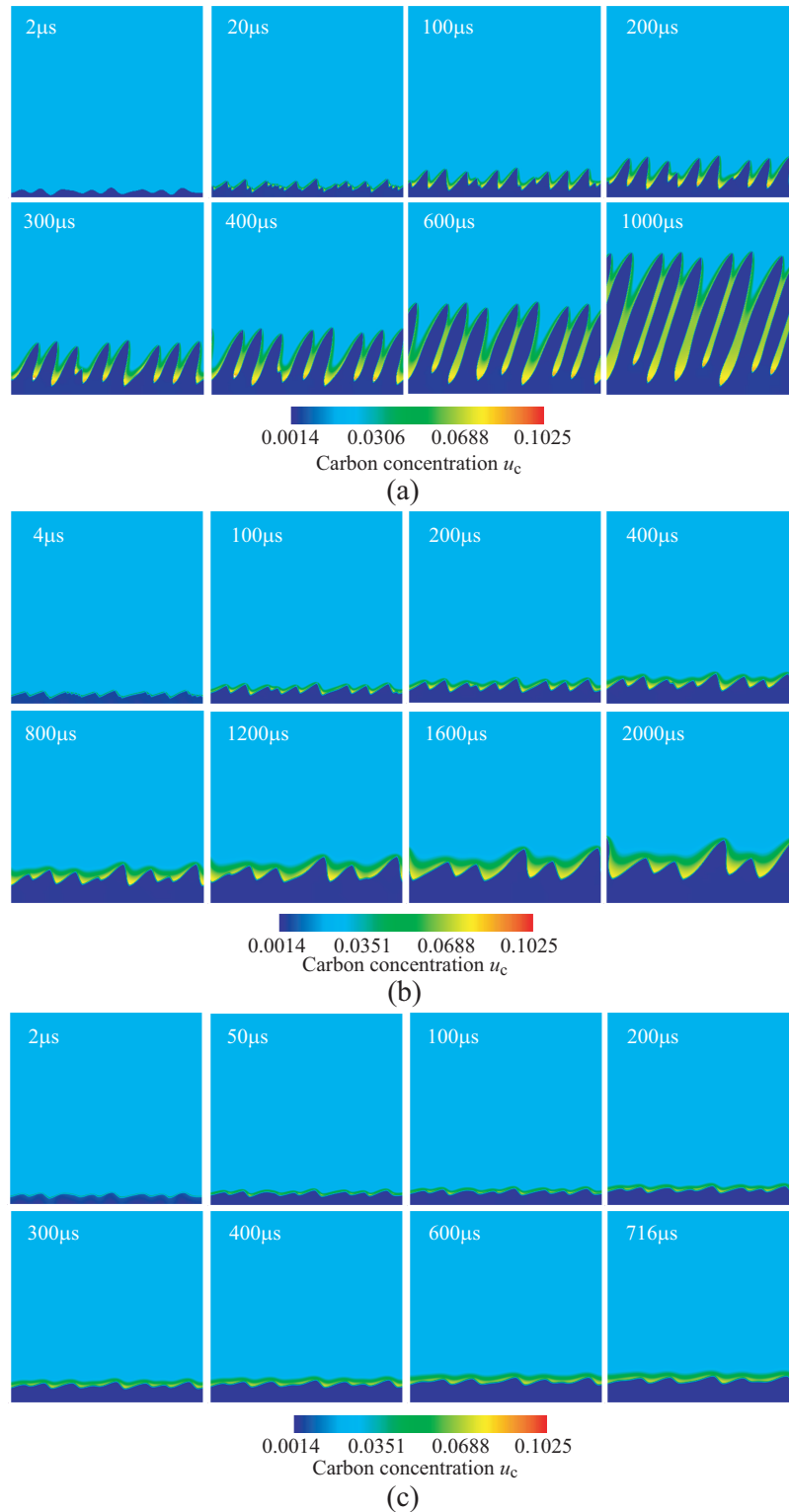


Fig.3.16 Growth of Widmanstätten ferrite plates for strength of anisotropy (a) $\xi = 0.6$, (b) $\xi = 0.4$ and (c) $\xi = 0.3$.

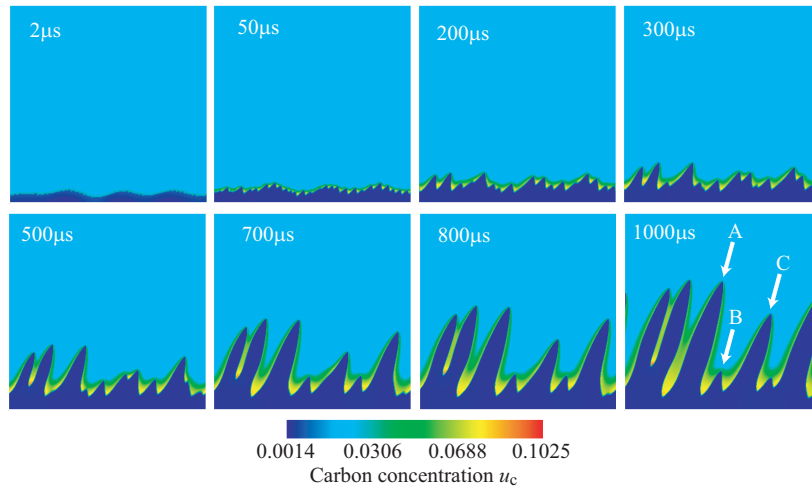


Fig.3.17 Growth of Widmanstätten ferrite plates from Allotriomorph ferrite with long wavelength initial interface for strength anisotropy $\xi = 0.6$.

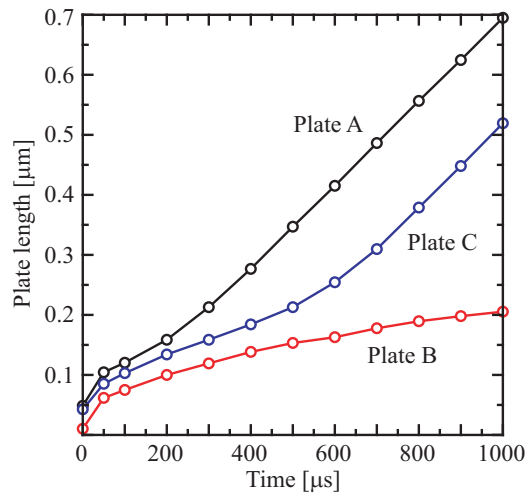


Fig.3.18 Variation of lengths of Widmanstätten ferrite plates indicated by white arrows in Fig.3.17.

界面よりも長い波長を有する界面形状になるように設定している。各プレートの形成過程を詳細に検討するため、図 3.17 中の矢印 A, B, C で示す各プレートのチップ先端位置の時間変化を図 3.18 に示す。Allotriomorph フェライトの初期界面がより滑らかな形状を有する場合においても、先に示した結果と同様に界面異方性が強い場合には、初期界面上にプレートのチップ部分が形成される ($2 \sim 50 \mu s$)。また、Allotriomorph フェ

ライトの凸状箇所形成されたプレート A, C のチップ部分は, 他のチップとの融合を経て, 優先的に Widmanstätten フェライトプレートへと成長することがわかる (50 ~ 1000 μ s). 一方, 初期界面の凹部においてもプレート B のチップが形成されるが, プレート A と C の成長過程で形成される炭素拡散領域によるソフトインピンジメントが生じ, プレート B の成長は大きく抑制されている.

以上の結果より, Allotriomorph フェライトから Widmanstätten フェライトプレートが形成するためには, 鋭いプレート先端形状を形成するような強い界面異方性が必要であることがわかる. また, Widmanstätten フェライトプレートは Allotriomorph フェライトの凸状箇所に優先的に形成され, その形成過程は α/γ 界面の形態不安定性 (132, 133, 134) で説明できることを示唆している. このとき, Widmanstätten フェライトプレートの形態, すなわちプレートの本数, 幅およびプレート間隔は, Allotriomorph フェライトの初期形態に大きく依存することが示唆される.

3.5 結言

本章では, 第2章2節で導出した Phase-Field モデルを用いて, Fe-C合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを実施可能とし, 一連のシミュレーションを行うことで $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α 相成長とそれに伴う炭素拡散挙動への各因子の影響について検討した. 以下に, 得られた結果をまとめる.

はじめに, Ae₃ 温度以下の広範な温度領域における α 相の成長および炭素拡散挙動の温度依存性について検討した. その結果, 温度が低下するほど界面の易動度と γ 相での炭素原子の易動度が減少するため, α 相の成長速度は小さくなっていくことを確認した. $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態が進行するに伴い, α/γ 界面近傍の γ 相において炭素濃度は増加するが, 界面における炭素濃度は局所平衡状態にならないことを示した.

次に, γ 相の初期炭素濃度の影響を検討した結果, $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態は初期炭素濃度が減少するにつれて, 炭素原子の拡散に律速された変態から界面律速変態の性質を呈するようになり, ある炭素濃度以下ではマッシブ変態が生じることを示した. さらに, この現象は $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態が拡散律速変態と界面律速変態の両方の性質を有し, 温度と濃度に依存して変化する変態機構に起因することを自由エネルギーの観点から示した. さらに, 873K から 673K の温度領域において, $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態がマッシブ変態へと移行する炭素濃度を評価した結果, その炭素濃度は $\alpha/\alpha + \gamma$ 境界付近に存在し, 温度の低下にともない

α 相の平衡組成に接近する。さらに、723K 以下の温度領域においては $\alpha + \gamma$ 相領域では界面律速変態は発生しないことを示した。

さらに、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態により生成される Widmanstätten フェライトの形成シミュレーションを行い、Widmanstätten フェライトの形態や形成過程に大きく影響を及ぼす界面異方性に関する各因子の影響について検討した。その結果、Widmanstätten フェライトが形成するためには、プレート状 α 相の鋭い先端形状を形成するような、強い界面異方性が必要があることがわかった。また、異方性強度が α 相形態および成長過程に及ぼす影響を検討した結果、異方性強度の増加は、チップ付近の界面エネルギーが $\theta = 0^\circ$ 方向の界面エネルギーに比して、より大きくなるためプレート伸張方向の成長が促進され、より鋭い先端形状を形成することを明らかにした。最後に、Allotriomorph フェライトから複数の Widmanstätten フェライトプレートが形成する過程を検討した結果、強い界面異方性により生成されたチップ先端は融合を繰り返した後、成長初期段階において形態不安定性により、選択的にプレート状に成長することという、Widmanstätten フェライトの形成メカニズムを明らかにした。

以上のように、Phase-Field 法による組織形成シミュレーションにおいて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を再現可能であり、温度や炭素濃度に依存した α 相の形成過程やそれに伴う炭素拡散挙動を予測することができる。そして、種々の条件で $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を再現可能であるので、本手法を援用することで、 α 相を含む組織の形成メカニズムを理解し、組織制御するための有益な指針を得ることができると考えられる。

第4章

多結晶 γ 相におけるフェライト粒成長シミュレーション

4.1 緒言

熱間圧延後の γ 組織を冷却すると、圧延工程において材料中に導入された、せん断帯や粒界に α 相が核形成し、成長を始める。そして、さらに冷却を続けると未変態 γ 相にパーライト組織、ベイナイト組織、マルテンサイト相が形成する。したがって、 α 粒の形成やその体積分率および未変態 γ 相内の濃度分布を予測することは、鉄鋼材料内部の複合組織形成の予測を行うために、最も重要な課題のひとつである。そのため、これまでに α 相の成長挙動を予測する手法が多く提案されており、Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov 型の式⁽⁵³⁾や第2章でも述べた Sharp interface モデルに基づく手法^(75, 76)などがある。最近ではモンテカルロ法⁽²⁴⁾やセルラーオートマトン法^(23, 25, 26, 27)を用いた手法が、 α 相の体積分率の変化のみならず組織形態も再現できるため注目されている。しかしながら、モンテカルロ法やセルラーオートマトン法は、実時間における評価および曲率の影響を導入できないなどの問題が残されている。

前節では、副格子モデルに基づく Phase-Field 法を用いて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による α 相の成長や形態変化を再現可能にしたが、この Phase-Field モデルでは CALPHAD 法により求められる化学的自由エネルギー関数を直接利用しているため、定量的な解析結果を得ることができるが、 α/α 界面や γ/γ 界面を正確に表現することができない欠点がある。したがって、多結晶 γ 相における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態や $\gamma + \alpha$ 2相組織の形成を予測できる手法を構築する必要がある。これに対し、Militzer ら⁽¹⁰³⁾らや Mecozzi ら^(104, 105)は、多結晶 γ 相における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態および α 粒成長過程を、Multi-Phase-Field 法を用いて

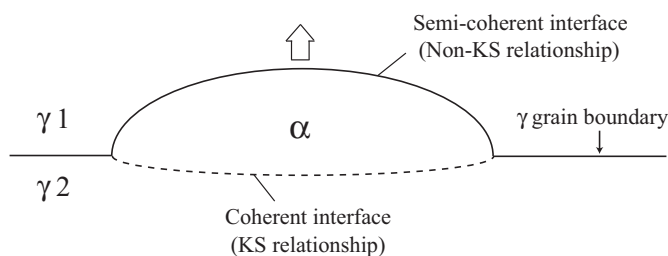


Fig.4.1 Schematic illustration of orientation relationship between γ and α phases growing from γ grain boundary.

再現し、シミュレーションで得られた α 相の体積分率変化が実験結果と良く一致することを示している。これらの研究では界面エネルギーは等方性を仮定しているが、実際の系においては界面モビリティや界面エネルギーは方位依存性を有しており、特に Kurdjumov-Sachs (KS) の結晶方位関係⁽¹³⁵⁾ が α 成長過程やその形態を大きく特徴づけていることが知られている⁽¹³⁶⁾。

そこで本章では、第2章3節で示した拡散変態の Multi-Phase-Field 法を用いて、Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における α 粒成長挙動を再現する。そして、冷却速度を種々に変化させ α 相の体積分率や $\alpha + \gamma$ 2 相組織の形成過程を予測可能であることを示す。さらに、界面エネルギーや界面モビリティの相依存性および方位差依存性を Multi-Phase-Field モデルに導入し、それらが α 相の成長挙動や組織形態に及ぼす影響を検討する。

4.2 相および結晶方位差に依存した界面特性のモデル化

図4.1に、 γ 粒界に形成した α 粒の形成過程の模式図を示す。 α 粒は、 γ 粒界面に核形成する際に隣り合う2つの γ 相のうち、どちらか一方と KS 関係を満たすように方位を選択する^(135, 136, 137, 138)。図中では、 α 相は γ_2 と KS 関係を満たしており、その α/γ 界面を破線で示している。この界面は整合性が高く界面エネルギーも界面モビリティも低いため、 α 相の成長過程においては、もう一方の KS 関係を満たさない α/γ 界面が移動する。また、界面エネルギーは隣り合う相の種類によっても異なる値を有する⁽¹³⁹⁾。したがって、Phase-Field 法を用いて α 粒の成長およびその形態変化を精度良く再現するためには、KS 関係のような結晶方位に依存した界面エネルギーや界面モビリティ

をモデル化し, Phase-Field モデルに導入する必要がある. しかしながら, 一般に界面エネルギーの値は実験的に測定することが難しく, α/γ 界面や γ/γ 界面の界面エネルギーは分子動力学法などを用いて計算されているが⁽¹⁴⁰⁾, 温度依存性などを考慮できないなどの理由で, 現在でも統一した値は示されていない. そこで本研究では, 相に依存した界面エネルギー (相依存界面エネルギー)⁽¹⁴¹⁾ を用いるとともに, Read-Shockley 方程式⁽¹⁴²⁾ を用いて方位差に依存した界面エネルギー (方位差依存界面エネルギー) および界面モビリティ (方位差依存界面モビリティ)^(24, 25) をモデル化し, Multi-Phase-Field モデルに導入する. 以下では, 以上のような界面特性のモデル化方法について述べる.

本章では, 第2章3節で示した Multi-Phase-Field 法を用いるので, N 個の粒を含む系を考える. それらの粒のうち, ある界面を構成する粒 i と粒 j の相が同じ場合, すなわち γ/γ 界面および α/α 界面の方位差依存界面エネルギー σ_{ij} を, Read-Shockley 型の次式を用いて表現する⁽²⁵⁾.

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} \sigma_{ij}^0 \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_0} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_0}\right) & \text{for } \Delta\theta < \Delta\theta_0 \\ \sigma_{ij}^0 & \text{for } \Delta\theta \geq \Delta\theta_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

一方, 粒 i と粒 j が異なる相の場合, すなわち α/γ 界面においては, 次式の界面エネルギーを用いる.

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} \frac{\sigma_{ij}^0}{2} + \frac{\sigma_{ij}^0}{2} \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_0} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_0}\right) & \text{for } \Delta\theta < \Delta\theta_0 \\ \sigma_{ij}^0 & \text{for } \Delta\theta \geq \Delta\theta_0 \end{cases} \quad (4.2)$$

ここで, $\Delta\theta_0$ は, 低角粒界の最小方位差であり, $\Delta\theta_0=15^\circ$ と定義する. σ_{ij}^0 は, 方位差がないときのバルクの界面エネルギーである. また, $\Delta\theta$ は結晶方位差であり, 粒 i の結晶方位 θ_i を用いて次式のように定義する.

$$\Delta\theta = \begin{cases} |\theta_i - \theta_j| \equiv |\theta_{ij}| & \text{for } 0 \leq |\theta_{ij}| \leq \pi \\ 2\pi - |\theta_{ij}| & \text{for } \pi < |\theta_{ij}| \leq 2\pi \end{cases} \quad (4.3)$$

一方, 方位差依存界面モビリティ M も同様に, 以下の Read-Shockley 型の式を用いて表現する⁽¹⁴³⁾.

$$M = M_0 \left[1 - \exp \left\{ -5 \left(\frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_0} \right)^5 \right\} \right] \quad (4.4)$$

ここで, M_0 はアレニウス型の界面モビリティ $M_0 = M_{00} \exp(-Q_\phi/RT)$ を用いる. このとき, M_{00} は定数, Q は活性化エネルギーおよび R はガス定数である⁽¹⁰³⁾.

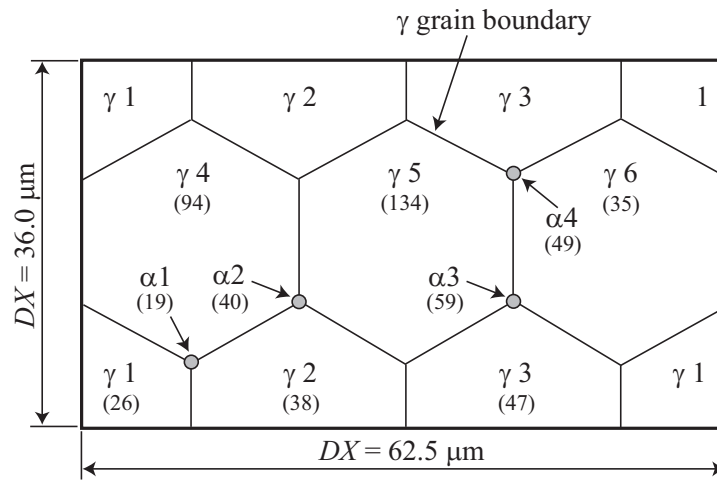


Fig.4.2 Illustration of initial distribution of α ($\alpha 1 \sim \alpha 4$) and γ ($\gamma 1 \sim \gamma 4$) phases and crystal orientations.

Table 4.1 Material and computational parameters

Reference temperature	T^R [K]	1073
Equilibrium concentration	C^R [wt.%]	0.00886
Slope of phase boundary	$\Lambda_{\gamma\alpha}$ [K/wt.%]	-186.2
Slope of phase boundary	$\Lambda_{\alpha\gamma}$ [K/wt.%]	-10350
Pre-exponential constant of M_0	M_{00} [$\text{m}^4 \text{J}^{-1} \text{s}^{-1}$]	3.5×10^{-7}
Activation energy of M_0	Q_ϕ [J mol^{-1}]	140×10^3
Pre-exponential factor of D_C^α	$D_C^{0\alpha}$ [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]	2.2×10^{-4}
Pre-exponential factor of D_C^γ	$D_C^{0\gamma}$ [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]	1.5×10^{-5}
Activation energy of D_C^α	Q_α [J mol^{-1}]	122.5×10^3
Activation energy of D_C^γ	Q_γ [J mol^{-1}]	142.1×10^3
Difference of entropy between α and γ	ΔS [$\text{J K}^{-1} \text{m}^{-3}$]	3.46×10^5
Interfacial energy of α / α interface	$\sigma_{\alpha\alpha}$ [J m^{-2}]	0.50
Interfacial energy of γ / γ interface	$\sigma_{\gamma\gamma}$ [J m^{-2}]	0.70
Interfacial energy of α / γ interface	$\sigma_{\alpha\gamma}$ [J m^{-2}]	0.45

4.3 解析モデルと解析条件

図 4.2 に、Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における α 粒成長の数値シミュレーションに用いる、解析モデルおよび初期 $\gamma + \alpha$ 組織を示す。初期温度は、 $T_0 = 1100 \text{ K}$ とし、種々

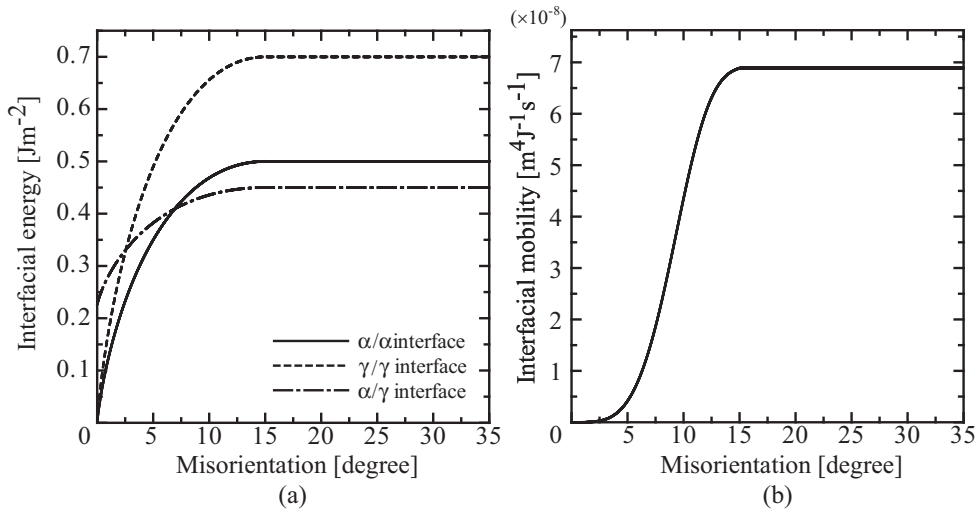


Fig.4.3 Variations in phase- and misorientation-dependent interfacial (a) energy and (b) mobility.

の冷却速度で連続冷却変態を行う。時間発展方程式の数値解析には、差分法を用いた。解析領域は、 $DX \times DY = 62.5 \times 36.0 \mu\text{m}^2$ の長方形領域とし、 165×90 の規則差分格子で離散化する。したがって、差分格子間隔は $\Delta x = \Delta y = 0.4 \mu\text{m}$ である。初期状態における γ 相の形態は、界面エネルギーの影響を見やすくするため、正六角形を仮定し、粒成長の Phase-Field シミュレーションを用いて作成した⁽⁹⁹⁾。全方向に周期境界条件を適用しているので、解析領域内には6つの γ 粒が存在する。また、Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションでは、本質的に核形成を取り扱うことができない。そこで、 α 相は γ 母相の粒界面や三重点に形成されやすいことから、4つすべての α 粒を三重点に配置した。このとき、 α 粒の半径は $r_0 = 3\Delta x = 1.2 \mu\text{m}$ とした。初期炭素濃度は、 α 相および γ 相ともに平衡組成を与えている。図 4.2 中の括弧内に示す数字は結晶方位であり、一様乱数を用いてランダムに与えている。ただし、 α 粒の方位は周囲の γ 粒のひとつと低角粒界を形成し、低い界面エネルギーと界面モビリティとなるように設定している。本研究では、 α_1/γ_1 , α_2/γ_2 , α_3/γ_3 および α_4/γ_3 の界面が低角粒界に対応している。

Fe-C-Mn 合金の線形化平衡状態図における各相境界線を表す式 (2.118) の各パラメータや界面エネルギーなどの物性値を表 4.1 に示す^(103, 141)。このとき、各界面の界面エネルギーおよび界面モビリティの方位差に対する変化は、図 4.3 のようになる。

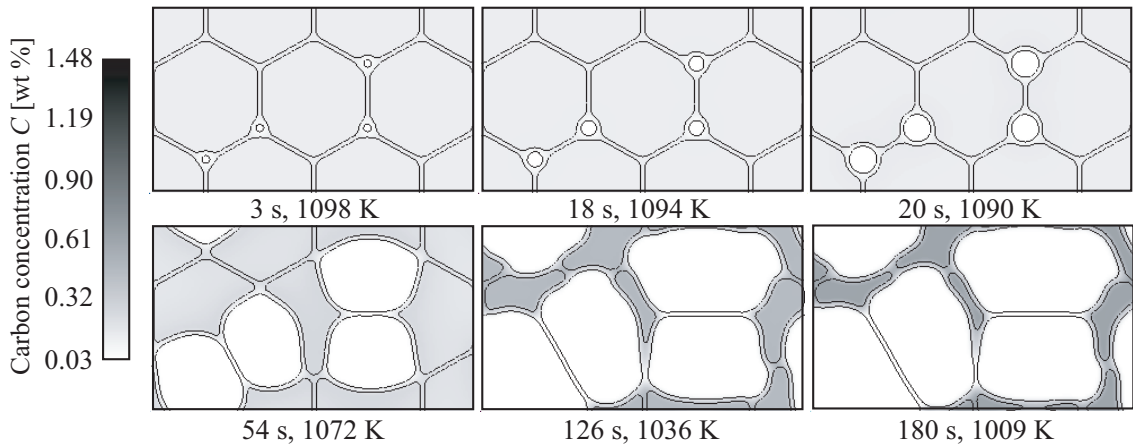


Fig.4.4 Evolution of α grains during continuous cooling at $\Delta T = 0.5$ K/s.

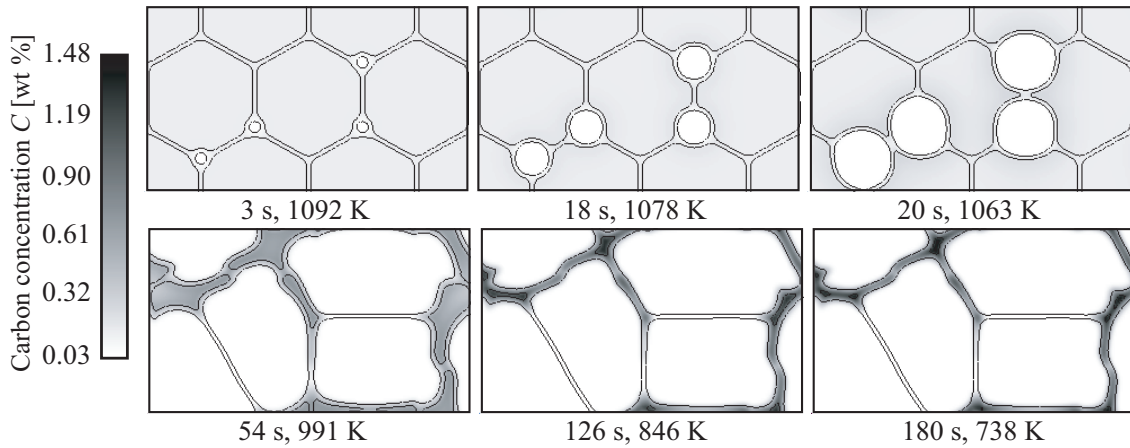
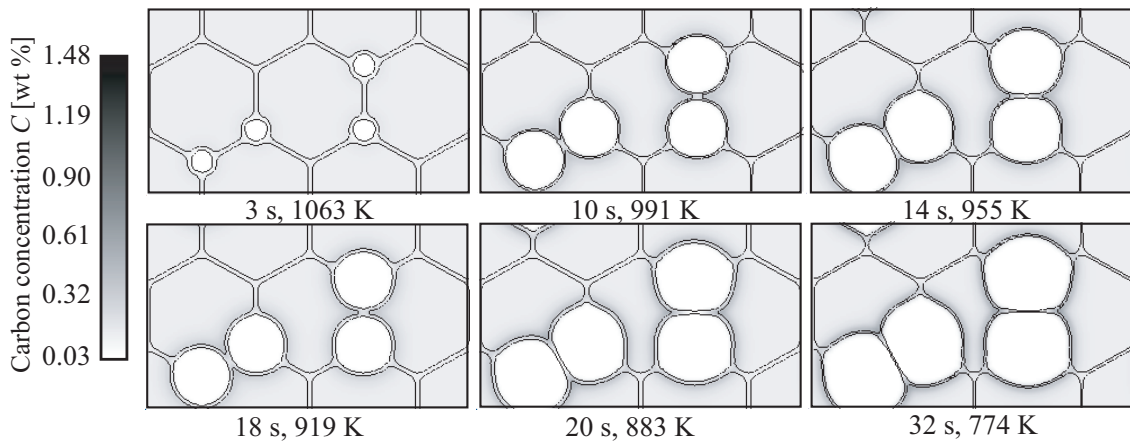
4.4 フェライト変態によるフェライト粒成長と組織形態変化

4.4.1 冷却速度が変態率およびフェライト粒形態に及ぼす影響

本節では、Multi-Phase-Field 法を用いて多結晶 γ 相を有する Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における α 粒成長挙動を再現可能であることを示すとともに、冷却速度が α 相の変態率および $\alpha + \gamma$ 2 相組織の形態に及ぼす影響を検討する。なお、ここでは界面エネルギーは 0.5 J/m^2 で一定、界面モビリティは等方性を仮定する。

図 4.4 に、冷却速度 $\Delta T = 0.5 \text{ K/s}$ における α 粒の成長過程を炭素濃度分布で示す。図中、黒色の実線 ($\sum_{i=1}^N \phi_i^2 = 0.55$) で挟まれた領域が結晶粒界を表している。温度の低下とともに、 α 相は γ 相への炭素の拡散を伴いながら成長していることがわかる。また、界面エネルギーが一定であるため、20 s までは α 粒は円形に成長している。そして、炭素拡散場のソフトインピンジメントもしくは粒同士が直接衝突して干渉しあうハードインピンジメントによって、 α 粒の形態が変化していることが確認できる。さらに、冷却を続けると γ 相でさらに炭素濃度が増加するので、化学的駆動力が減少し、かつ温度の低下によって界面モビリティが低下するため、 α 粒の成長が抑制されていることがわかる。

次に、冷却速度 $\Delta T = 2.0 \text{ K/s}$ における α 粒成長に伴う炭素濃度分布の変化を図 4.5 に示す。この場合も、初期に α 粒を配置した三重点から α 粒が炭素の拡散を伴いなが

Fig.4.5 Evolution of α grains during continuous cooling at $\Delta T = 2.0$ K/s.Fig.4.6 Evolution of α grains during continuous cooling at $\Delta T = 10.0$ K/s.

ら成長している。このとき、冷却速度が大きくなることで図4.4の場合よりも化学的駆動力が増加し、 α 粒の成長が速くなっていることがわかる。そして、この場合も温度低下によって界面モビリティは小さくなるが、図4.4の場合よりも化学的駆動力が大きいため、126 sでは領域内がほぼ α 相に変態している。しかしながら、 α 粒に挟まれた γ 相では炭素濃度が濃化しているため、 α 粒は成長できず、 γ 相が未変態のままであることがわかる。

さらに、冷却速度 $\Delta T = 10.0$ K/sにおける α 粒の成長過程を図4.6に示す。冷却速度がさらに大きいため、各温度での変態駆動力は大きくなる。したがって、図4.7に示す

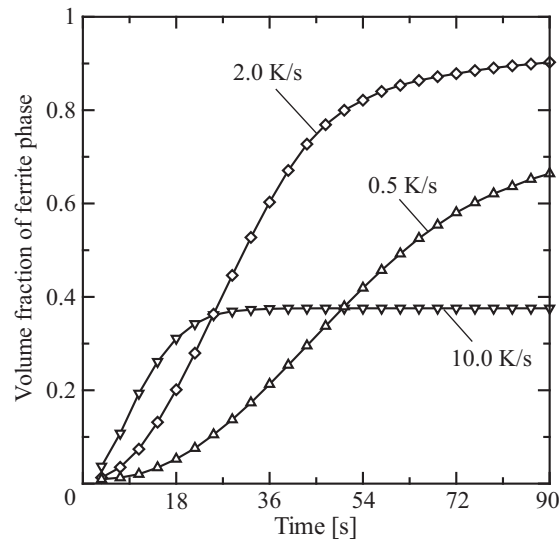


Fig.4.7 Effect of cooling rate on volume fraction change of ferrite phase.

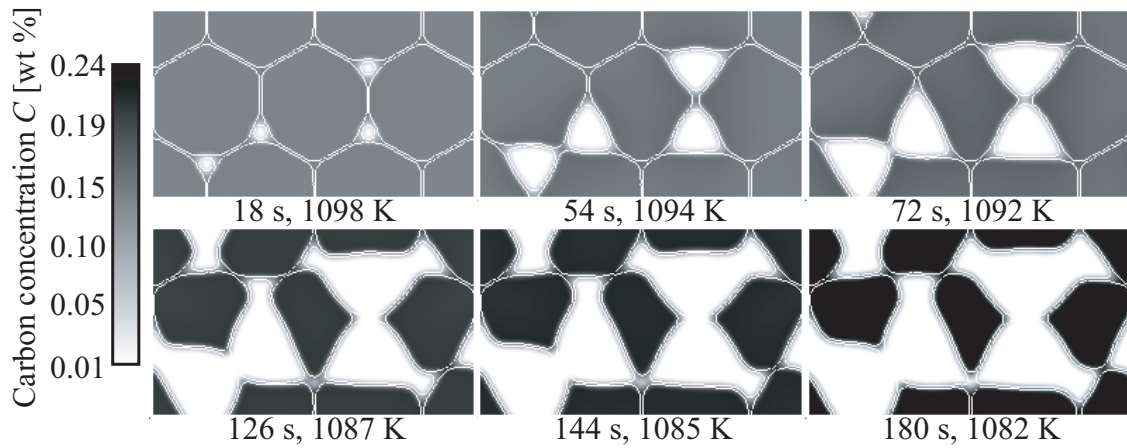
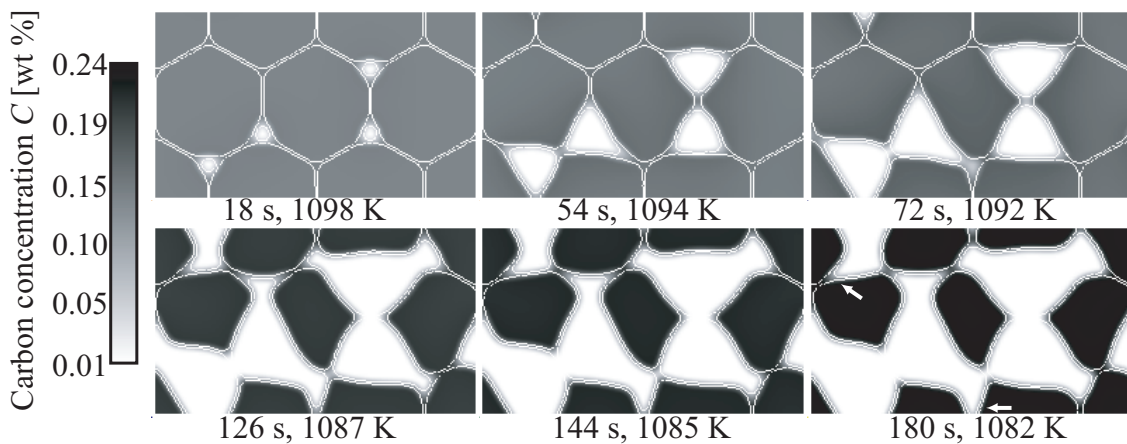
ように、変態初期は他の冷却速度の場合に比べて、 α 相の変態率が大きくなっている。しかしながら、温度低下による拡散係数および界面易動度の減少が著しいので、 α/γ 界面前方の γ 相における炭素原子の偏析量が増加し、 α 粒の成長は大きく抑制される。特に、32 s以降は α 粒はほとんど成長していない様子が確認できる。

以上のように、Multi-Phase-Field法を用いて $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を再現することで、前節で用いた副格子モデルに基づくPhase-Fieldモデルでは不可能な、多結晶 γ 相における α 粒の成長が予測可能であることがわかる。したがって、 α 相の成長に伴う炭素拡散による γ 相内の炭素濃度変化や未変態 γ 相を含む $\alpha + \gamma$ 2相組織の形成予測が可能である。さらに、このような炭素濃度が濃化した未変態 γ 相において θ が析出してパーライト組織やベイナイト組織が形成されるので、本解析で得られる情報を利用して、より低温領域で形成される変態組織を再現すれば、複合組織形成過程を予測することが可能である。

4.4.2 フェライト粒形態に及ぼす界面エネルギーの影響

次に、相依存界面エネルギーおよび方位差依存界面エネルギーが α 粒の成長挙動および組織形態に及ぼす影響を検討する。ここでは、冷却速度 $\Delta T = 0.1$ K/sで一定とし、方位差依存界面モビリティは考慮しない。

図4.8に、相依存界面エネルギーを用いた場合の α 粒の成長挙動を示す。界面エネル

Fig.4.8 Evolution of α grains with phase-dependent interfacial energy.Fig.4.9 Evolution of α grains with phase- and misorientation-dependent interfacial energy.

ギーの等方性を仮定した図4.4の結果と比べると、 α 粒が γ 粒界に沿って成長していることがわかる。これは、界面エネルギーの寄与が化学的自由エネルギーの寄与よりも大きいいため、他の粒界よりも界面エネルギーの小さい α/γ をより多く形成するように、 α 粒が成長し、系全体の自由エネルギーを最小化しているものと考えられる。

次に、相および方位差に依存した界面エネルギーを有する α 粒の成長過程を図4.9に示す。このとき得られる $\alpha + \gamma$ 組織形態は、図4.8に示したものと大きな差異がないが、図4.9において矢印示したように、 α 粒の γ 粒界に沿った成長が更に促進されている。

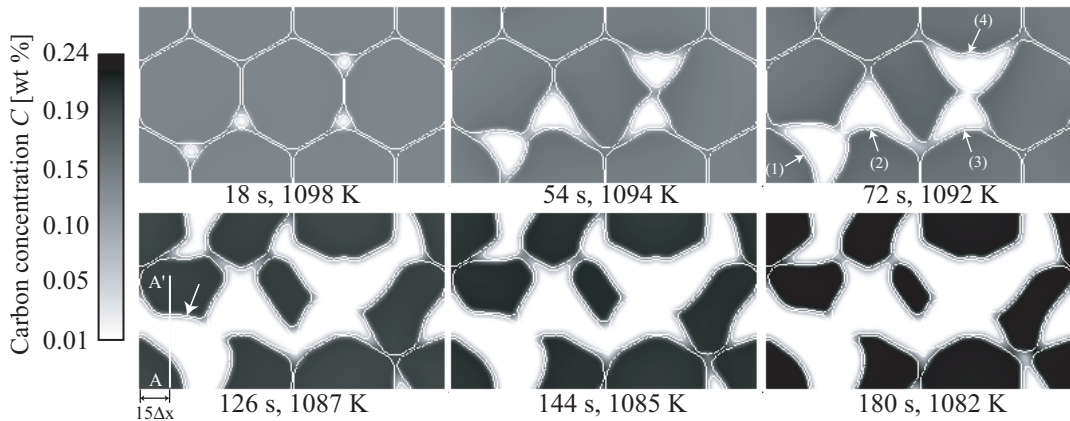


Fig.4.10 Evolution of α grains with phase- and misorientation-dependent interfacial energy and misorientation-dependent mobility.

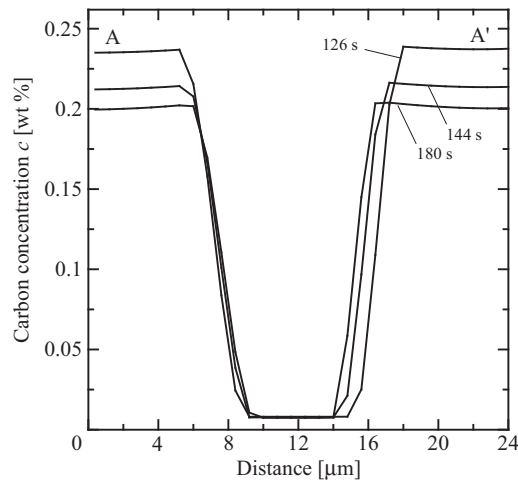


Fig.4.11 Distribution of carbon concentration along line A-A' in Fig. 4.9.

4.4.3 フェライト粒形態に及ぼす界面モビリティの影響

本節では、方位差依存界面モビリティが α 粒の成長挙動および組織形態におよぼす影響に検討を加える。図 4.10 に、相および方位差に依存した界面エネルギーと界面モビリティを有する場合の α 粒の成長過程を示す。ここで、(1) ~ (4) で示した α/γ 界面は低角粒界に対応し、界面エネルギー、界面モビリティともに低い値を示している。図 4.9 に示した結果と同様に、 α 粒は γ 粒界に沿って成長していることが分かる。

さらに, 図 4.11 に図 4.10 の A-A' 断面における炭素濃度分布を示す. この図から, α 相の成長により γ 相の炭素濃度が増加するとともに, 高い界面エネルギーと界面モビリティを有する, A' 側の α/γ 界面のみが移動することで α 相が成長する様子を再現できていることがわかる. また, このときの α 相の形態は, 粒界アロトリオモルフフェライトと呼ばれる組織に類似した特徴的な組織形態を呈していることがわかる⁽¹⁴⁴⁾.

以上の結果より, Multi-Phase-Field 法を用いて, 多結晶 γ 相における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態をモデル化し, 相および方位差に依存した界面エネルギーおよび界面モビリティを考慮することによって, α 粒は γ 相に沿って成長し, 図 4.1 に示したような特徴的な α 粒の成長過程や組織形態を再現することができる.

4.5 結言

本章では, 第 2 章 3 節で示した Multi-Phase-Field 法を用いて, Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行い, 冷却速度, 相および方位差に依存した界面エネルギーや界面モビリティが α 粒の成長挙動や組織形態に与える影響を検討した. 以下に, その結果をまとめる.

まず, 冷却速度が α 相の変態率および α 粒形態に及ぼす影響を検討したところ, 冷却速度の増加は $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の化学的駆動力を増加させるため, α 粒の成長を促進する. 一方, それと同時に温度の低下とともに炭素原子の拡散係数および界面モビリティが減少する. そのため, α/γ 界面の移動速度が減少し, α/γ 界面近傍の γ 相における炭素原子の偏析量が増加することで, α 粒の成長を抑制することがわかった.

次に, 相および方位差に依存した界面エネルギーや界面モビリティが α 粒の成長挙動や組織形態に与える影響を検討した結果, 界面エネルギーの最も低い α/γ 界面をより多く形成するように, α 粒は γ 粒界に沿って成長した. すなわち, $\alpha + \gamma$ 組織の形態は, 系の全自由エネルギーのうち, 界面エネルギーを小さくする過程で特徴づけられていることがわかった. さらに, 方位差依存界面モビリティを導入することによって, α 相は界面モビリティの大きな α/γ 界面のみを移動させて, 隣あう一方の γ 相にのみ成長することを再現した. このような α 粒成長挙動は, γ 相と KS 関係を満たす α 相の成長挙動と類似しており, より現実的な α 粒の成長過程や組織形態を再現するためには, 界面エネルギーや界面モビリティの相・方位差依存性を考慮する必要があることを示している.

第5章

炭素鋼におけるパーライト組織形成過程の数値シミュレーション

5.1 緒言

鉄鋼材料の変態組織は、フェライト (α)、パーライト、ベイナイトおよびマルテンサイトなど多種多様である。なかでも、パーライト組織は微細な α 相とセメンタイト (θ) の層状組織であり、力学特性に優れているため様々な鉄鋼材料の内部組織として広く用いられている。したがって、数値シミュレーションによって鉄鋼材料の複合組織形成および力学特性を予測可能とするためには、冷却工程における α 変態後のパーライト変態を数値シミュレーションによって再現する必要がある。従来、パーライト組織の成長を予測する数理モデルは、Zener-Hillert モデルがよく知られており、ラメラ間隔と過冷度よりパーライト組織の成長速度を算出することができる^(145, 146)。しかしながら、Zener-Hillert モデルでは、パーライト組織に特徴的なラメラ、コロニーおよびブロックなどの組織形態の形成過程は予測することができない。

これに対し、Nakajima らは Multi-Phase-Field 法を用いて、炭素鋼におけるパーライト変態をモデル化し、パーライトラメラの形成過程を再現可能としている⁽¹⁴⁷⁾。彼らは、Zener-Hillert モデルにおいて考慮されていなかった、 α 相における炭素拡散を Phase-Field モデルにおいて考慮し、Zener-Hillert モデルで算出される値よりも実験値に近いパーライト組織の成長速度が予測できることを示している。さらに、Steinbach らはパーライト変態によって生じる変態応力が炭素拡散を促進させ、得られるパーライト組織の成長速度が、Nakajima らの結果よりもさらに実験値に近づくことを示している⁽¹⁴⁸⁾。しかしながら、これらのシミュレーションで予測されるパーライトラメラ

の成長速度は、未だ実験よりも小さい値であり、その理由の一つとして粒界拡散の影響を考慮していないことが考えられる。

そこで、本研究では第2章3節で示した Multi-Phase-Field 法を用いて Fe-C-Mn 合金におけるパーライト変態の数値シミュレーションを実施する。そして、粒界拡散を Phase-Field モデルに導入し、ラメラ間隔や粒界拡散の大きさがパーライト組織の成長速度や組織形態に及ぼす影響を検討する。さらに、パーライト組織は前節で示したような $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態後の炭素濃度が増加した未変態 γ 相において生じることから、 γ 相における炭素濃度の不均一性を仮定し、パーライト組織の形態への影響評価を行う。

5.2 解析モデルおよび解析条件

解析モデル、初期条件および境界条件を説明する。パーライト組織形成に及ぼすラメラ間隔、粒界拡散および γ 相中の濃度不均一性の影響を調べるために、解析モデルは問題に応じて変化させる。ラメラ間隔、粒界拡散の影響を評価する場合の解析モデル A を、図 5.1 に示す。解析領域は $DX = DY = 0.24 \mu\text{m}$ の正方形領域であり、初期のラメラ組織として、 α 相と θ を解析領域下部に配置する。ここで、ラメラ間隔 λ は、図

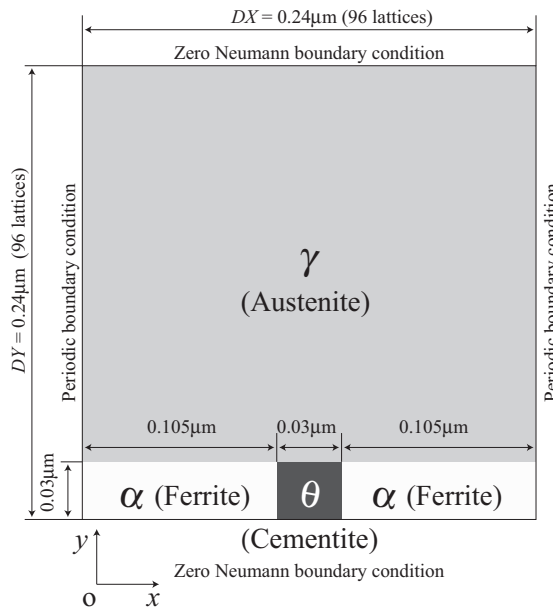


Fig.5.1 Simulation model A and initial conditions.

5.2のように定義するため、解析領域 x 方向の大きさ DX が、ラメラ間隔に対応している。したがって、ラメラ間隔 λ を変化させることは、 DX を変化させることに等しい。差分格子は 96×96 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。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。

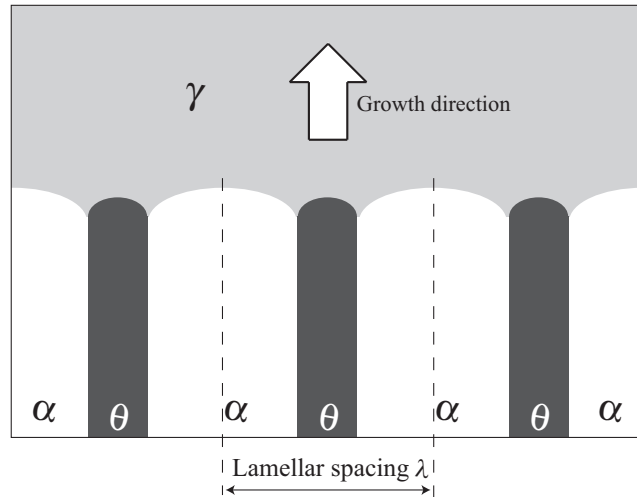


Fig.5.2 Lamellar spacing λ .

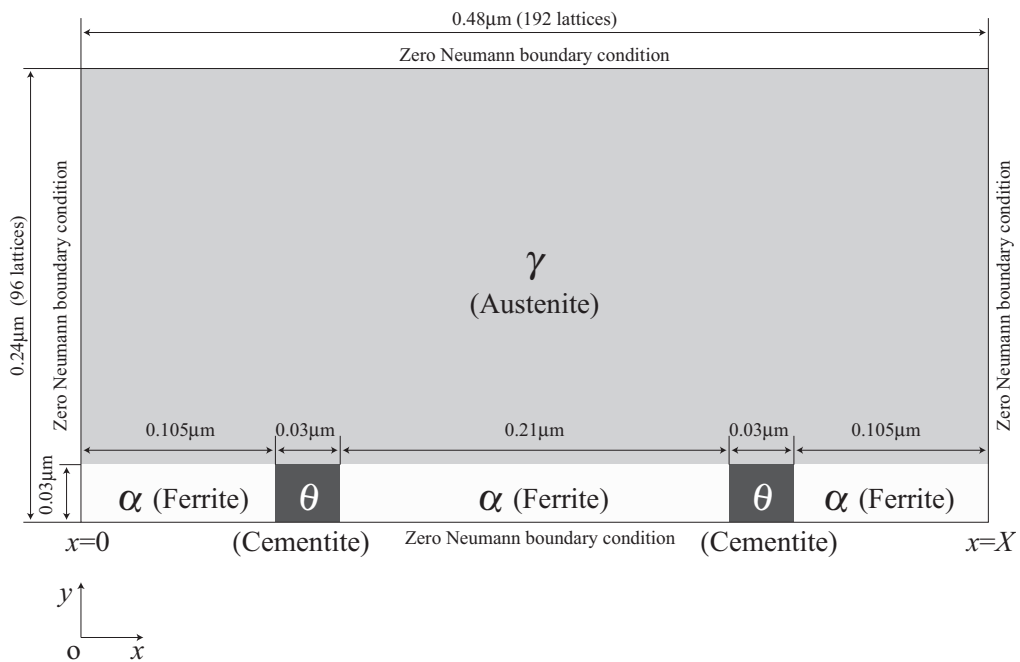


Fig.5.3 Simulation model B and initial conditions.

一方, γ 相中の濃度不均一性の影響を調べるための解析モデル B を図 5.3 に示す. この解析モデルでは, 全方向で零ノイマン境界条件を用いる. 解析領域の大きさは, $DX = DY = 0.48 \times 0.24 \mu\text{m}$ とし, 解析領域下端に初期ラメラを 2 つ配置する. そして, γ 相内の濃度分布は, Case A ~ C として次式を用いて与える.

$$\text{Case A : } C = C_0 \quad (5.1)$$

$$\text{Case B : } C = C_0 \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{x}{X} \right)^2 + \frac{5}{6} \right\} \quad (5.2)$$

$$\text{Case C : } C = C_0 \left\{ \left(1 - \frac{x}{X} \right)^2 + \frac{2}{3} \right\} \quad (5.3)$$

ここで, $C_0 = 0.77 \text{ wt. } \%$ とし, Case A ~ C どの場合も γ 相内の炭素濃度の積分値が一定になるように初期炭素濃度分布を与えている. Case A ~ C の初期炭素濃度分布は図 5.4 に示すようになる.

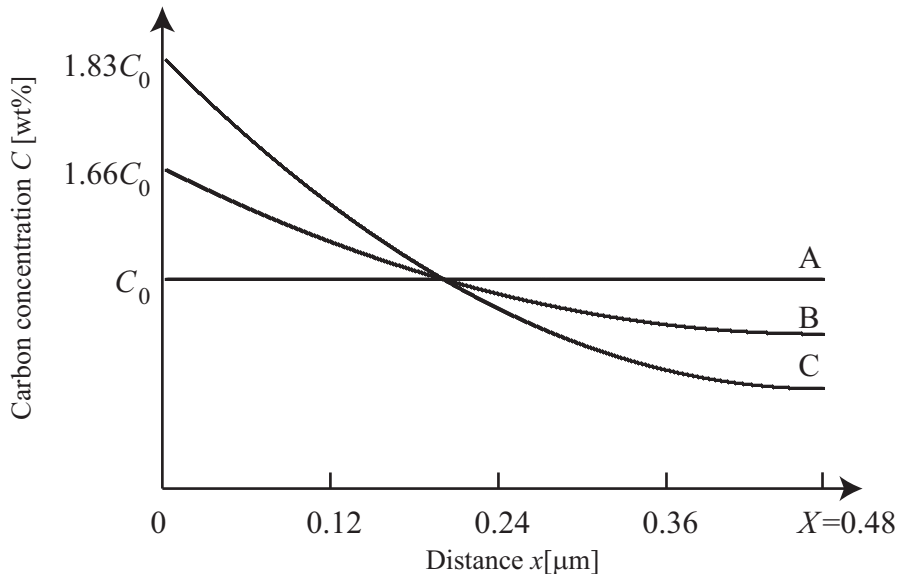


Fig.5.4 Initial distributions of carbon concentration in γ phase.

両解析モデルにおいて, 温度 $T = 970 \text{ K}$ 一定で等温保持を行う. 初期組織における α 相と θ の体積比は, 平衡状態図を用いて, 共析温度直下の温度における共析鋼中の α 相と θ の重量比をてこの原理により求める⁽¹⁴⁹⁾. α 相と θ の密度がそれぞれ 7.86 g/cm^3 , 7.4 g/cm^3 とほぼ等しいことから, これを体積比として α 相 : $\theta = 7 : 1$ としている⁽¹²⁾. 各相の初期の炭素濃度は, α 相と θ では共析温度 1000 K における平衡組成, γ 相では共析鋼の炭素濃度と等しい $0.77 \text{ wt. } \%$ とする.

Table5.1 Material and computational parameters.

Interface thickness	δ [μm]	0.02
Interfacial energy	$\sigma_{\gamma\alpha}$ [J/m^2]	1.0
	$\sigma_{\gamma\theta}$ [J/m^2]	1.0
	$\sigma_{\alpha\theta}$ [J/m^2]	1.0
Interfacial mobility	$M_{\gamma\alpha}$ [$\text{m}^4/(\text{J}\cdot\text{s})$]	1.0×10^{-12}
	$M_{\gamma\theta}$ [$\text{m}^4/(\text{J}\cdot\text{s})$]	2.0×10^{-12}
	$M_{\alpha\theta}$ [$\text{m}^4/(\text{J}\cdot\text{s})$]	5.0×10^{-18}
Transformation entropy ⁽¹⁵⁰⁾	$\Delta S_{\gamma\alpha}$ [$\text{J}/(\text{m}^3\cdot\text{K})$]	0.35×10^6
	$\Delta S_{\gamma\theta}$ [$\text{J}/(\text{m}^3\cdot\text{K})$]	1.11×10^6
	$\Delta S_{\alpha\theta}$ [$\text{J}/(\text{m}^3\cdot\text{K})$]	2.89×10^6
Reference temperature ⁽¹⁵¹⁾	T^R [K]	990.7
Reference concentration ⁽¹⁵¹⁾	$C_{\gamma\alpha}^R$ [atom%]	3.46
	$C_{\alpha\gamma}^R$ [atom%]	8.89×10^{-2}
	$C_{\gamma\theta}^R$ [atom%]	3.45
	$C_{\theta\gamma}^R$ [atom%]	2.50×10
	$C_{\alpha\theta}^R$ [atom%]	1.02×10^{-1}
	$C_{\theta\alpha}^R$ [atom%]	2.50×10
Slope of phase boundary line ⁽¹⁵⁰⁾	$\Lambda_{\gamma\alpha}$ [K/atom%]	-3.16×10
	$\Lambda_{\alpha\gamma}$ [K/atom%]	-2.19×10^3
	$\Lambda_{\gamma\theta}$ [K/atom%]	9.25×10
	$\Lambda_{\theta\gamma}$ [K/atom%]	-1.00×10^3
	$\Lambda_{\alpha\theta}$ [K/atom%]	9.97×10^2
	$\Lambda_{\theta\alpha}$ [K/atom%]	-1.00×10^3
Pre-exponential factor of diffusion coefficient ⁽¹⁵²⁾	D_0^γ [m^2/s]	1.5×10^{-5}
	D_0^α [m^2/s]	2.2×10^{-4}
	D_0^θ [m^2/s]	1.8×10^{-6}
Activation energy of diffusion coefficient ⁽¹⁵²⁾	Q^γ [J/mol]	142.1×10^3
	Q^α [J/mol]	122.5×10^3
	Q^θ [J/mol]	172.8×10^3

表 5.1 に、本解析で用いる界面幅 δ , i 相と j 相間の界面エネルギー σ_{ij} , 線形化平衡状態図の各パラメータ, および拡散係数の pre-exponential factor D_0^i と活性化エネルギー Q^i の値を示す. 以後, 本文中で特に示さない限り, ここで示した物性値およびパラメータを用いる. そして, Phase-Field 法では界面領域は $0 < \phi_i < 1$ の領域として定義されるので, この界面領域内で拡散係数を k ($k = 1, 2, 3, \dots$) 倍することで粒界拡散を表現する.

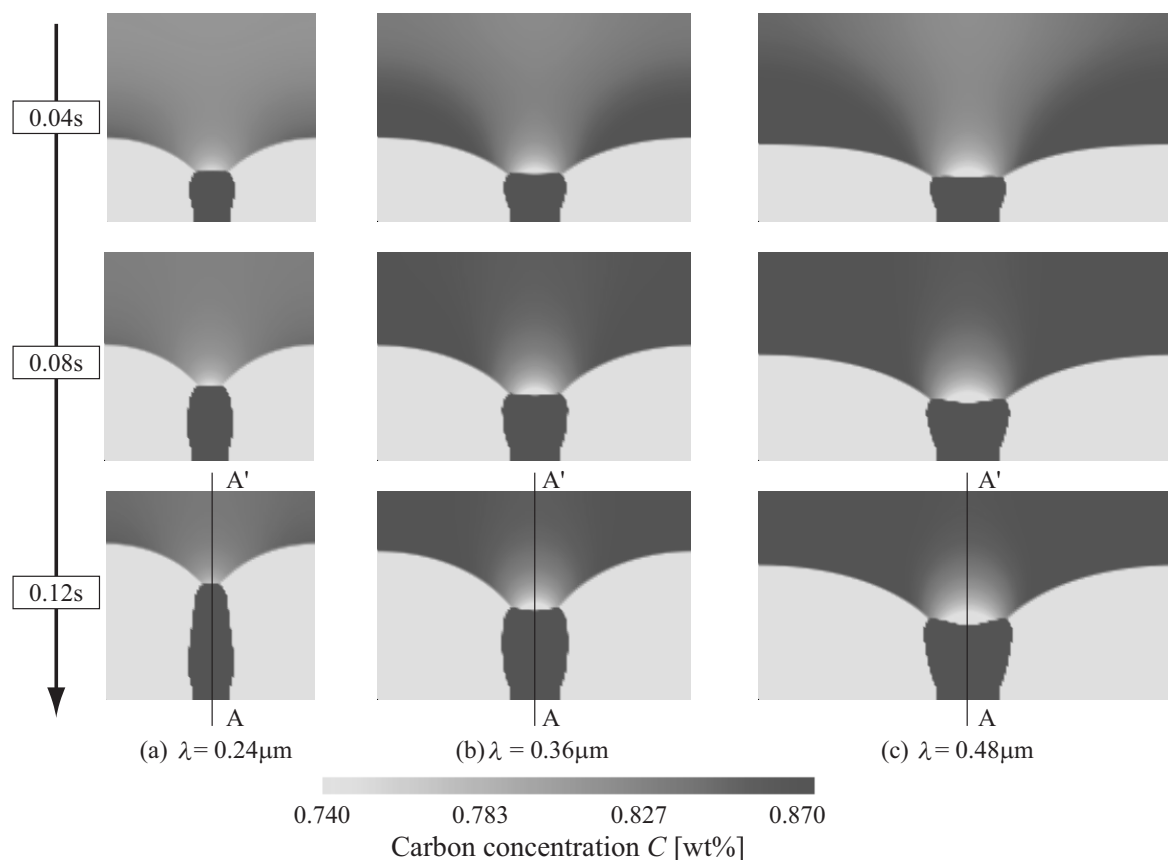


Fig.5.5 Evolutions of pearlite lamellar with different lamellar spacings (a) $\lambda = 0.24\mu\text{m}$, (b) $\lambda = 0.36\mu\text{m}$, and (c) $\lambda = 0.48\mu\text{m}$.

5.3 パーライト変態によるラメラ組織形成過程

5.3.1 パーライトラメラ成長のラメラ間隔依存性

ラメラ間隔 λ がパーライト組織形成に及ぼす影響を評価するため、 λ を種々に変化させて、数値シミュレーションを行った。ここで、解析領域 y 方向の大きさは、いずれも $DY = 0.24\mu\text{m}$ であり、粒界拡散は考慮していない($k = 1$)。

図5.5 (a)~(c)に、ラメラ間隔 $\lambda = 0.24, 0.36, 0.48\mu\text{m}$ のパーライト組織の形成過程を炭素濃度分布で示す。パーライト変態は、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態と θ 析出の競合反応であるので、炭素原子を排出する α 相の成長と、炭素原子を取り込む θ の成長が同時に起こる。したがって、ラメラが成長するに伴って α 相近傍の γ 相では炭素濃度が増大し、 θ の近傍の γ 相では炭素濃度が減少している様子がみてとれる。ここで、図5.5のA-A'で

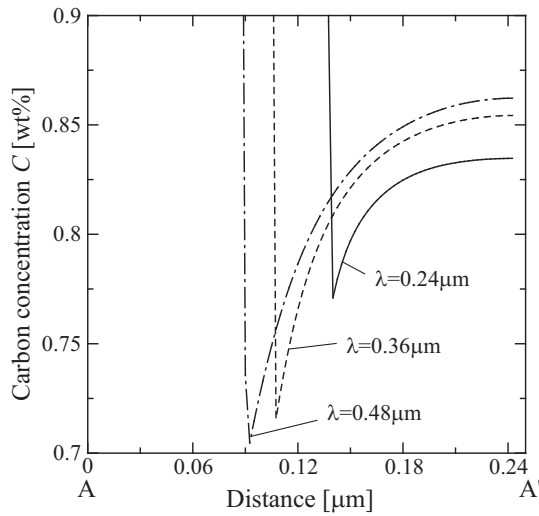


Fig.5.6 Carbon concentrations on A-A' lines in Fig.5.5.

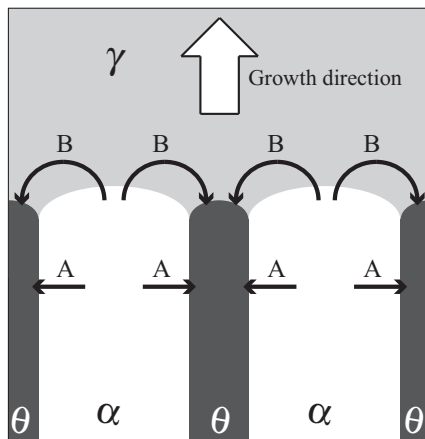


Fig.5.7 Possible diffusion paths during pearlite transformation.

示す断面の γ/θ 界面近傍における γ 相の炭素濃度分布を、図 5.6 に示す。この図より、ラメラ間隔が大きいほど γ/θ 界面の γ 相側で炭素濃度が大きく減少していることがわかる。これはラメラ間隔が大きくなるほど、 θ が成長するために、 γ/θ 界面からより多くの炭素原子が θ に取り込まれていることを示している。さらに、ラメラの成長過程においては、炭素原子は図 5.7 に示すように、 α/θ 界面から直接（矢印 A）、あるいは γ 相を介して（矢印 B）、 α 相から θ に拡散するが、矢印 B の拡散経路の距離はラメラ間隔の増加に伴って大きくなり、炭素原子は長い距離を拡散する必要がある。そのため、ラメラ間隔が大きくなるほど α 相から θ への炭素原子の分配が遅くなり、 θ

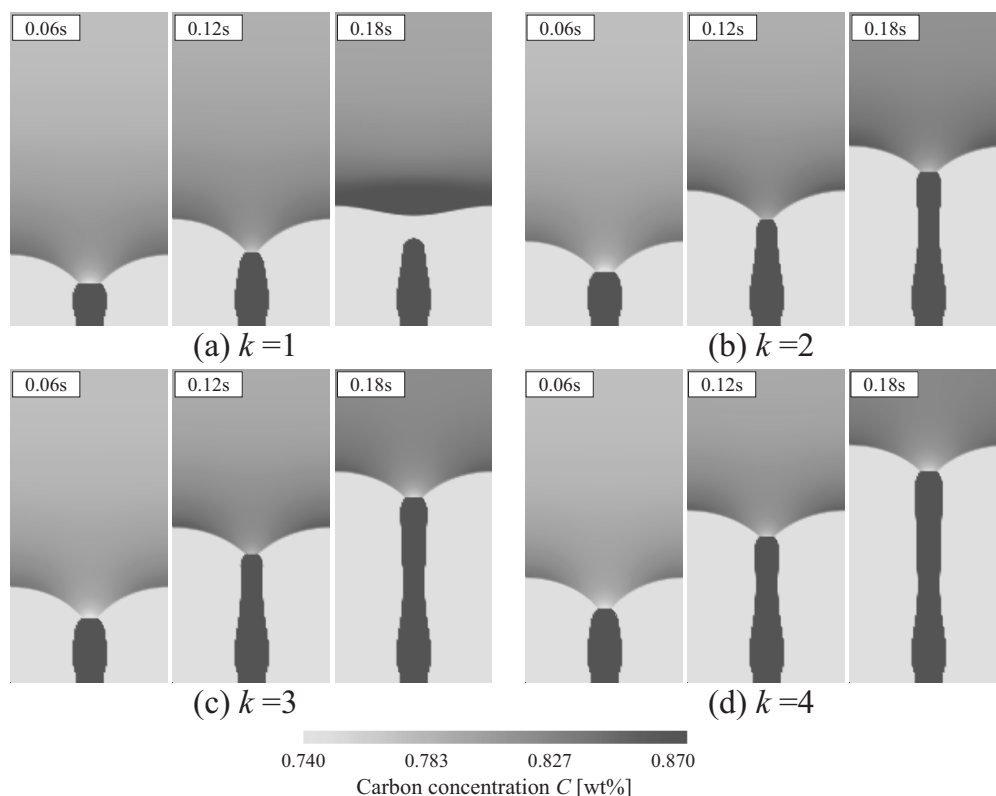


Fig.5.8 Evolution of pearlite lamellar accompanying with grain boundary diffusion for (a) $k = 1$, (b) $k = 2$, (c) $k = 3$, and (d) $k = 4$.

の成長が抑制される。このため、ラメラの成長が遅くなったと考えられる。このようにラメラ間隔 λ が大きいほど、ラメラの成長が遅くなるのは、実験や Zener-Hillert モデルで得られる結果と同様の傾向を示すものである^(153, 154)。

一方、矢印 A の拡散経路はラメラ間隔の影響を受けないので、ラメラ間隔が大きくなるほど矢印 A の経路による拡散量が相対的に多くなる。したがって、ラメラ間隔が大きくなるほど θ の x 方向への成長が増していることがわかる。

5.3.2 パーライト組織形成に及ぼす粒界拡散の影響

前節では、パーライト変態が炭素原子を γ 相へ排出する α 相の成長と、炭素原子を取り込む θ の成長が同時に起こる競合反応であるため、変態に伴う炭素原子の拡散および炭素濃度分配がパーライト組織の成長を支配していることを示した。また、前節で示したパーライト組織の形成過程において、 α 相から θ への炭素原子の拡散経路として、 α/θ 界面から直接拡散する経路 A と γ 相を介して拡散する経路 B を考慮してシ

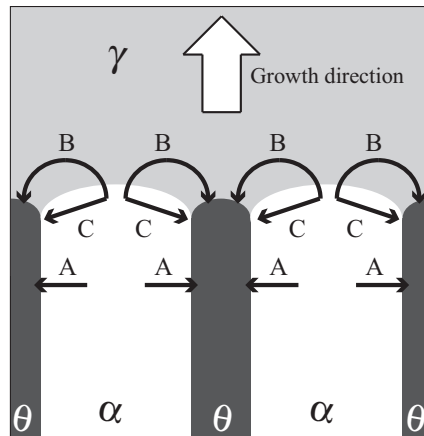


Fig.5.9 Possible diffusion paths during pearlite transformation including boundary diffusion.

ミュレーションを行った。しかしながら、一般に結晶粒界は結晶粒内に比べ格子欠陥が多いため侵入型固溶元素である炭素原子の拡散が速く、パーライト組織形成において重要な役割を果たしていることが指摘されている⁽¹⁵⁵⁾。そこで本節では、粒界拡散がパーライト組織形成過程やラメラの成長速度に及ぼす影響を検討する。

図 5.8 (a) ~ (d) に、粒界拡散を導入しない場合 ($k = 1$) と、粒界拡散を考慮し $k = 2, 3, 4$ とした場合のパーライト組織形成過程を炭素濃度分布で示す。ここで、解析領域 y 方向の大きさは、いずれも $DY = 0.48 \mu\text{m}$ である。図 5.8 (a) の粒界拡散を導入しない場合 ($k = 1$) では、0.12 s までは、 α 相と θ が協調的に成長しているが、その後 θ の成長方向前方で炭素濃度が低下すると、 α 相が θ の前にせり出すように成長し、最終的に θ の成長が止まり擬似パーライト組織⁽¹²⁾ を呈している。一方、粒界拡散を導入すると、図 5.9 に示す矢印 C のような拡散経路が追加されることによって、 α 相と θ 間の濃度分配が十分に行われ、 α 相、 θ の協調的な成長が可能となっていることが分かる。そして、粒界拡散が速いほど、パーライトラメラの成長が速くなることが示されている。以上の結果より、パーライト組織の成長には粒界拡散が非常に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。

また、本解析から得られるラメラの成長速度を、 θ/γ 界面の移動速度として評価したときの、粒界拡散の大きさ k とラメラの成長速度 V の関係を図 5.10 に示す。実験結果によれば、温度 970 K の等温保持におけるラメラの成長速度は $5.0 \sim 10.0 \mu\text{m/s}$ と見積もられる⁽¹²⁾。本解析で得られる成長速度は、実験値よりも小さいが、粒界拡散を導入し、その効果が大きくなるほど、Nakajima らの報告しているパーライト組織の

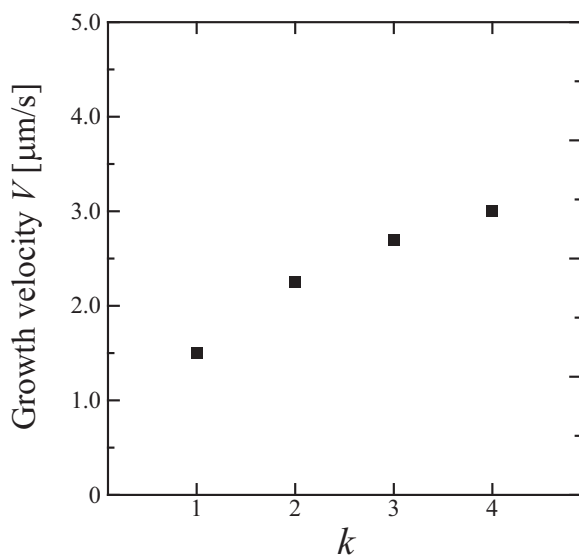


Fig.5.10 Dependence of growth velocity of pearlite lamellar V upon k .

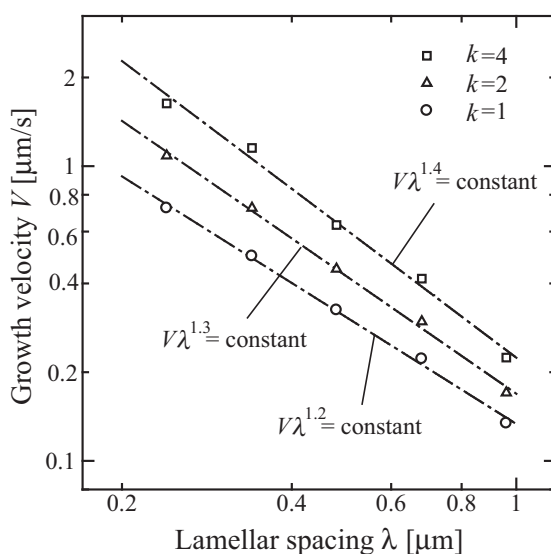


Fig.5.11 Effect of grain boundary diffusion on relationship between growth velocity of pearlite lamellar V and lamellar spacing λ .

成長速度 (約 $2\mu\text{m/s}$)⁽¹⁴⁷⁾ よりも、実験値に近づいていることが分かる。したがって、実験で得られるパーライト組織の成長速度を予測するためには、粒界拡散の影響を考慮する必要があることが示唆される。

さらに、Mellor ら^(156, 157) によると、Fe-C-X系合金においては、パーライトラメラ

の成長速度 V とラメラ間隔 λ の間には,

$$V\lambda^n = \text{constant} \quad (5.4)$$

の関係があることが示されており, パーライトラメラの成長が γ 相における炭素の拡散に律速される (体拡散律速) 場合には $n = 2$, 粒界拡散に律速 (界面拡散律速) される場合には $n = 3$ であることを指摘している. そこで, 本解析においても粒界拡散の大きさ k および λ を変化させて, V と λ の関係を調べた. その結果, 図 5.11 に示のように, 本解析においても V と λ の間には, 式 (5.4) の関係があることが示されたが, γ 相における炭素拡散および粒界拡散を考慮しているにも関わらず, n の値は $n = 1.2 \sim 1.4$ と上記の値よりも小さい値となることがわかった. ただし, k の値が大きくなり粒界拡散の効果が大きくなるほど, n の値は増加する傾向にあることがわかる.

5.3.3 γ 相中の炭素濃度分布がパーライト組織形態に及ぼす影響

パーライト変態は, より高温領域において発生する $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態後の炭素濃度が増加した未変態 γ 相内で生じやすい. このとき γ 相内の炭素濃度は不均一であり, パーライト組織の成長速度および組織形態は, この炭素濃度の不均一性に依存して変化すると考えられる. そこで, 本節では γ 相における不均一な炭素濃度分布を想定し, 解析領域内に濃度勾配を与えることで, γ 相内の炭素濃度分布がパーライト組織形成過程に及ぼす影響を検討する. なお本節においては, 粒界拡散 $k = 2$ を考慮する.

図 5.12(a) ~ (c) に, 図 5.4 に示した Case A ~ C の濃度分布を与えたときの, パーライト組織形成過程を示す. 前節で述べたように, パーライト変態は炭素原子を γ 相へ排出する α 相の成長と, 炭素原子を取り込む θ の成長が同時に起こる競合反応であり, γ 相に炭素濃度の不均一を与えた場合, γ 相の炭素濃度の低い領域では α 相の成長が速く, 炭素濃度の高い領域で θ の成長が速くなる. したがって, 炭素濃度に不均一性のない Case A ではパーライトラメラが y 方向に対して, 平行に成長している. 一方, Case B では解析領域の右側ほど炭素濃度が低く α 相の成長が速くなるため, ラメラがわずかに左方向へ曲がって成長していることがわかる. さらに, Case C においては粒界拡散 ($k = 2$) を考慮しているにも関わらず, 右側のラメラの成長端前方において, 炭素原子が欠乏し θ の成長が抑制されるため, α 相が θ の前面にせり出して擬似パーライト組織を呈していることがわかる.

以上の結果より, γ 相内の炭素濃度の不均一に依存して, α 相と θ 相の成長速度が変化することが, 図 5.13 に示すようなパーライトラメラ組織の屈曲や θ の途切れが形

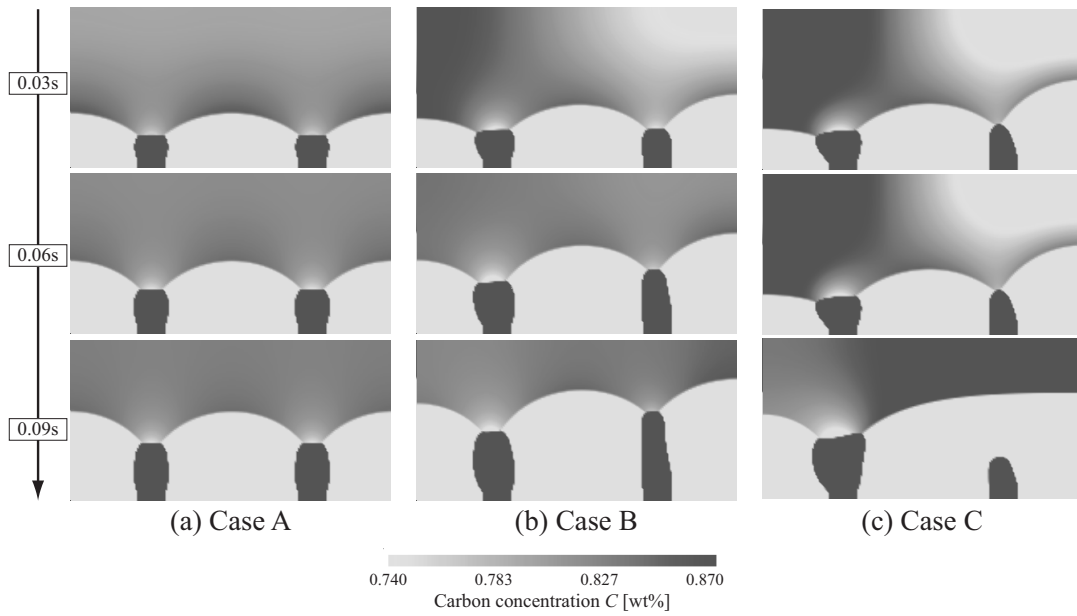


Fig.5.12 Distributions of carbon concentration during pearlite transformation for (a)Case A, (b)Case B, (c)Case C.

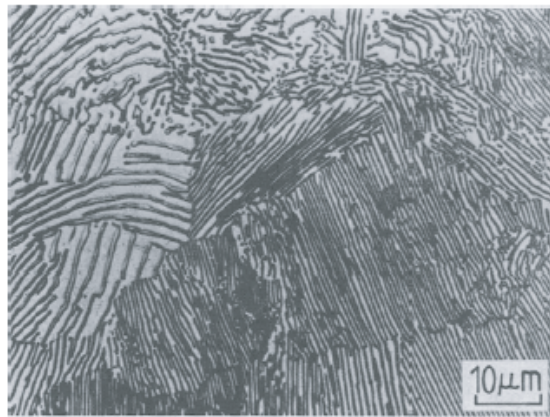


Fig.5.13 Optical micrograph of lamellar pearlite in plain carbon steel⁽¹⁵⁷⁾.

成される一因であることがわかる。

5.4 結言

本章では、第2章3節で示した Multi-Phase-Field 法を用いて、Fe-C-Mn 合金におけるパーライト変態をモデル化し、一連の数値シミュレーションを実施することにより、

ラメラ間隔, 粒界拡散および γ 相中の炭素濃度の不均一性がパーライト組織の形成過程に与える影響を明らかにした。以下に, 得られた知見をまとめる。

まず, パーライト組織形成において重要な組織因子であるラメラ間隔がパーライト組織形成過程に及ぼす影響を評価するため, 初期ラメラ間隔を種々に変化させて数値シミュレーションを行った。その結果, ラメラ間隔が小さくなるほどラメラの成長が速くなるという, 実験や Zener-Hillert モデルで報告されている結果と同様の傾向を示した。さらに, パーライト組織の成長に伴い α 相は γ 相へ炭素原子を排出し, θ は γ 相から炭素原子を取り込むが, このときの γ/α 界面での炭素濃度上昇および γ/θ 界面での炭素濃度低下が, ラメラの成長を抑制することを確認した。そして, α 相から θ への炭素原子の拡散経路として, α/θ 界面から直接拡散する経路と γ 相を介して拡散する経路の両方を考慮したが, α 相と θ の間で濃度分配が十分に行われずラメラの協調的な成長を実現できない場合には, α 相は θ の前にせり出すよう成長し, 擬似パーライト組織を呈することがわかった。

次に, パーライト組織の形成に大きく寄与していると指摘されている, 粒界拡散の影響を検討するために, 界面領域において拡散係数を増加させることで粒界拡散を表現し, 数値シミュレーションを行った。その結果, 粒界拡散により各相間で濃度分配が十分に行われるようになったため, パーライトラメラを形成する α 相と θ の協調的な成長が助長されることが明らかになった。また, 粒界拡散が大きくなるほど, α 相と θ の間の濃度分配が速くなるため, パーライト組織の成長速度は大きくなった。そして, その成長速度は Nakajima らの解析結果よりも, 実験で得られる成長速度に近い値であることが示された。

最後に, パーライト変態が $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態後の未変態 γ 相において生じることから, γ 相に炭素濃度の不均一性を与えて, 数値シミュレーションを行った。その結果, γ 相内において炭素濃度が低いところでは, α 相の成長は促進されるが θ の成長は抑制された。そして, このような炭素濃度の不均一性に依存して変化する, α 相と γ 相の成長挙動の違いによって, 実際のパーライト組織に見られるようなラメラの曲がりや θ の途切れなどのパーライト組織に特徴的な形態が形成されることを明らかにした。

以上のように, Multi-Phase-Field 法を用いてパーライト変態をモデル化し, 各種影響因子を変化させて数値シミュレーションを実施することで, 従来の数理モデルで予測されるような成長速度のみならず, 組織形成過程を明らかにすることができる。

第6章

塑性緩和を伴うマルテンサイト変態による組織形成過程

6.1 緒言

鉄鋼材料を A_{e1} 温度から急冷し、フェライト変態やパーライト変態が生じる前に、 γ 相を M_s 点以下に冷却すると、原子の拡散を伴わずに炭素原子を固溶したまま Fe 格子のせん断変形によって立方晶から正方晶へと結晶構造変化するマルテンサイト変態が生じる。このとき形成されるマルテンサイト相は、非常に硬く、高い降伏強度を有するため、高強度鋼の重要な強化相として広く用いられている。したがって、本研究で構築している数値シミュレーションによる鉄鋼材料の材質予測手法においても、マルテンサイト相を含む鉄鋼材料の材質予測を可能とする必要がある。そのためには、Phase-Field 法を用いてマルテンサイト変態をモデル化し、数値シミュレーションによってマルテンサイト組織の形成過程を再現することが求められる。

これに対し、鉄鋼材料におけるマルテンサイト相の組織形態は、材料の化学組成や変態温度に依存して様々に変化し、薄板状、レンズ状、ラス状の組織が実験的に観察される^(158, 159)。このようなマルテンサイト相の多種多様な組織形態は、多数のバリエーションを形成する自己緩和 (Self-accommodation, SA)、または、母相およびマルテンサイト相において塑性変形を生じる塑性緩和 (Plastic accommodation, PA) による変態ひずみの緩和過程、すなわち弾性ひずみエネルギーを最小化する過程に特徴づけられている^(160, 161)。したがって、マルテンサイト変態による組織形成過程を Phase-Field 法で再現するためには、マルテンサイト組織に伴う弾性応力場の変化を精度よく評価する必要がある。

これまでに, Shenoy ら^(162, 163) や Ahluwalia ら⁽¹⁶⁴⁾ は, ひずみのべき乗展開で表される Landau 型の自由エネルギー関数⁽¹⁶⁰⁾ を用いたマルテンサイト変態の Phase-Field モデルを提案し, 双晶マルテンサイト組織の形成過程を再現している. しかしながら, これらの Phase-Field モデルでは, ひずみ量を秩序変数としているため, 数値解析においてひずみの適合条件式を解かなければならず, 数値計算が煩雑になる. これに対し, Khachaturyan らは, Micromechanics 理論に基づくマルテンサイト変態の Phase-Field モデルを提案し, 現在では Phase-Field Microelasticity (PFM) 理論として体系化されている^(51, 107, 165, 166). この Phase-Field モデルでは, マルテンサイト変態で形成しうるマルテンサイト相の各バリエーションの存在確率を秩序変数とすることで, 任意形状のマルテンサイト相を含む系の弾性ひずみエネルギーを評価でき, 平衡方程式をフーリエ変換を用いて解くため, ひずみの適合条件を解く必要がない. したがって, これまでに様々な合金におけるマルテンサイト変態および組織形成過程に適用され, その有用性が示されている. さらに, このような Micromechanics 理論に基づくマルテンサイト変態の数値モデルは, Wechsler-Lieberman-Read (WLR) 理論⁽¹⁶⁷⁾ や Bowles-Mackenzie (BM) 理論⁽¹⁶⁸⁾ などの現象論的マルテンサイト結晶学理論 (Phenomenological Theory of Martensite Crystallography, PTMC) と, 弾性エネルギーを最小にする解を見つけるという点で本質的に等価であることが知られており, PFM 理論に基づく Phase-Field モデルでもマルテンサイト組織の結晶学的特徴を再現することができる^(51, 108, 169). しかしながら, 上記のような Phase-Field モデルでは, 薄板マルテンサイトに見られる双晶マルテンサイト組織の形成過程を再現することはできるが, レンズマルテンサイトやラスマルテンサイトのような変態中に塑性変形が伴う, すなわち PA が作用するマルテンサイト組織形成過程を再現することはできない.

そこで, 本研究ではラスマルテンサイトなどを含めた, より一般的なマルテンサイト組織形成過程を再現可能とすることを目的とし, PFM 理論に基づき PA と SA の両方が生じるマルテンサイト変態を表現する, 弾塑性 Phase-Field モデルを新たに構築した (導出過程は, 第 2 章 4 節に示す). 本章では, この Phase-Field モデルを用いて, 立方晶から正方晶へのマルテンサイト変態による組織形成過程の 2 次元シミュレーションを行うそして, はじめに単結晶母相におけるマルテンサイト相の成長過程を再現し, マルテンサイト組織形成過程における SA および PA によるひずみ緩和挙動を明らかにする. ついで, 実用鉄鋼材料においては多結晶母相でマルテンサイト組織が形成されることから, 多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションを行い, 母相

粒間の弾性相互作用や PA, SA によるひずみ緩和挙動がマルテンサイト組織形成過程に及ぼす影響を検討する.

6.2 解析モデルおよび解析条件

本節では, 単結晶母相および多結晶母相におけるマルテンサイト組織形成過程の数値シミュレーションで用いる解析モデル, 解析条件について述べる. 本研究では, 平面ひずみ状態を仮定して2次元空間において数値シミュレーションを行うため, 母相(001)面上で, 母相の[100], [010]方向と平行なc軸をもつ2つのバリエーション V1, V2 の時間発展を記述する. したがって, 時間発展方程式(2.158)は ϕ_1 と ϕ_2 について解析する. このとき, 式(2.147)の変態ひずみは次式のように表される.

$$\epsilon_{ij}^t = \sum_{m=1}^2 R_{ik}(\theta) \epsilon_{kj}^{00}(m) \phi_m \quad (6.1)$$

ここで, $\epsilon_{ij}^{00}(m)$ ($m = 1, 2$) は, V1 および V2 のマルテンサイト相が形成される際に生じる変態ひずみであり, それぞれ次式で与える.

$$\epsilon_{ij}^{00}(1) = \begin{bmatrix} -0.1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}, \quad \epsilon_{ij}^{00}(2) = \begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & -0.1 \end{bmatrix} \quad (6.2)$$

また, $R_{ij}(\theta)$ は多結晶構造をなす各母相粒の結晶方位を表現するために用いる回転マトリクスであり, x 軸と母相[100]方向がなす角度 θ を母相粒の結晶方位と定義する.

単結晶母相および多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションに共通して, 解析領域は, $DX = DY = 512 \text{ nm}^2$ の正方形領域とし, 256×256 の差分格子で規則分割する. また, 等方弾性体を仮定し, Fe-30%Ni合金の弾性係数, $C_{11} = 140$, $C_{44} = 28$, $C_{12} = 84 \text{ GPa}$ を用いる⁽²³⁾. さらに, マルテンサイト相は, $\phi_i \geq 0.6$ の領域と定義し, 各相の降伏応力を与える. 本研究では母相およびマルテンサイト相の強度が, ひずみ緩和挙動やマルテンサイト相の組織形態に及ぼす影響を検討するため, 表6.1に示す Case 1 ~ 3 の3通りの降伏応力を用いる. Case 1では, PAが生じない熱弾性型マルテンサイト変態⁽¹⁷⁰⁾を想定し, 塑性変形が生じないような大きな降伏応力を用いる. 一方, Case 2とCase 3では降伏応力は異なるが, PAが生じる非熱弾性型マルテンサイト変態を想定している⁽¹⁷¹⁾. 式(2.151)と式(2.158)のカイネティックパラメータは, $K = 0.001$ と $L' = 1$ を用いる⁽¹¹⁰⁾. また, 勾配エネルギー係数は, $\kappa = 1.0 \times 10^{-15} \text{ Jm}^2/\text{mol}$ とする.

Table 6.1 Yield stresses of parent and martensite phases

Case	Parent phase: σ_y^c	Martensite phase: σ_y^t	
1	∞	∞	(Thermoelastic type)
2	250 MPa	800 MPa	(Non-thermoelastic type)
3	500 MPa	1200 MPa	(Non-thermoelastic type)

図 6.1 に、単結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションで用いる解析モデルを示す。紙面を母相 (001) 面とし、解析領域の x, y 方向をそれぞれ母相の [100], [010] 方向に一致させる。したがって、紙面手前方向が [001] 方向に対応する。単結晶母相におけるマルテンサイト変態を再現する場合は、式 (6.1) において $R_{ij}(\theta) = \delta_{ij}$ とする。そして、初期状態において解析領域全体を母相単相 ($\phi_1 = \phi_2 = 0$) とし、解析領域の中心に V1 のマルテンサイト相 ($\phi_1 = 1, \phi_2 = 0$) を配置する。このとき、マルテンサイト相は弾性ひずみエネルギーを最小化するように、母相の (110) 面に沿ってプレート形状に成長することから、初期マルテンサイト相の形態をアスペクト比 $a : c = 10 : 1$ の楕円形状とする^(172, 173, 174)。変態駆動力、すなわち母相とマルテンサイト相の自由エネルギー差は、 $\Delta f = 321 \text{ J/mol}$ とする。

図 6.2 に、多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションで用いる解析モデルを示す。図に示すような粒数が 10 個の多結晶構造を粒成長の Multi-Phase-Field シミュレーション⁽¹⁰¹⁾ で作成し、各母相粒にランダムに結晶方位 θ を与える。このとき、紙面を母相 (001) 面とし、粒内の座標軸および数字が、それぞれ各母相粒の [100], [010] 軸および結晶方位を表している。さらに、マルテンサイト相は粒界や転位などの結

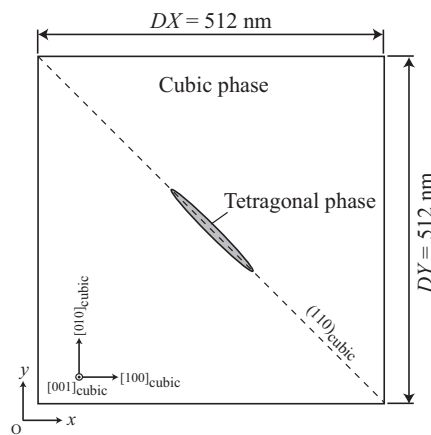


Fig.6.1 Simulation model for martensitic transformation in single crystal of parent phase.

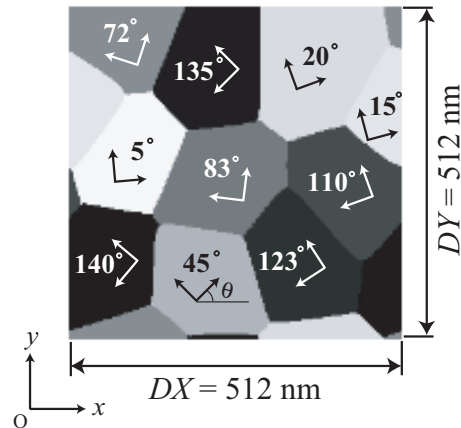


Fig.6.2 Simulation model of polycrystalline structure with ten parent grains. The number in each grain indicates crystal orientation, θ .

晶欠陥に核形成し、成長することから、本研究では粒界近傍に微小な塑性ひずみ ϵ_{12}^p を分布させる。実際には、粒界に分布する塑性ひずみの大きさは隣り合う粒同士の方位差や転位密度に依存するが、本研究では $\epsilon_{12}^p < 0.01$ を満たす大きさの塑性ひずみを一様乱数を用いて与えた。本シミュレーションでは、変態駆動力を $\Delta f = 198 \text{ J/mol}$ とする。

6.3 単結晶母相におけるマルテンサイト変態挙動

6.3.1 マルテンサイト相の成長過程における塑性緩和挙動

本節では、単結晶母相におけるマルテンサイト変態を再現し、マルテンサイト相の成長および組織形成過程におけるPAによる変態ひずみの緩和挙動を明らかにする。なお、ここではPAによるひずみ緩和挙動を詳細に評価するために、SAは生じないように、 $\phi_2 = 0$ としている。

図6.3(a)に、変態中にPAが生じない熱弾性マルテンサイト変態 (Case 1) による、マルテンサイト相の成長にともなう相当応力分布の変化を示す。図中、白色と黒色の実線は $\phi_1 = 0.6$ で定義されるマルテンサイト相と母相の界面位置、 s' は無次元化した時間単位を表している。この場合、PAやSAで変態ひずみを緩和することができないため、マルテンサイト相は母相の(110)面に沿って成長し、アスペクト比が増すほど、マルテンサイト相周囲の応力集中を緩和している。一方、図6.3(b)に示す非熱弾性マルテンサ

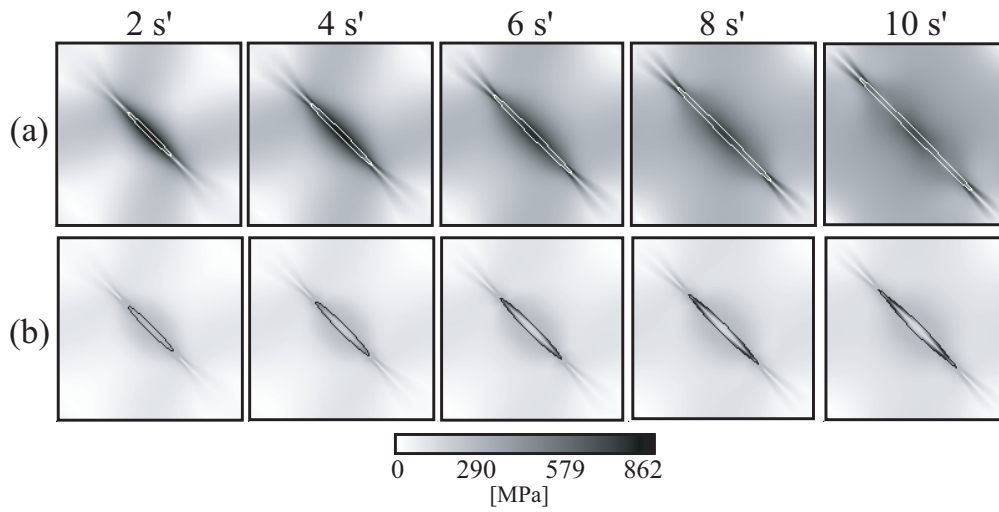


Fig.6.3 Distributions of equivalent stress during (a) thermoelastic and (b) non-thermoelastic growth of martensite phase (V1) without SA. Black and white solid lines indicate profile of $\phi_1 = 0.6$.

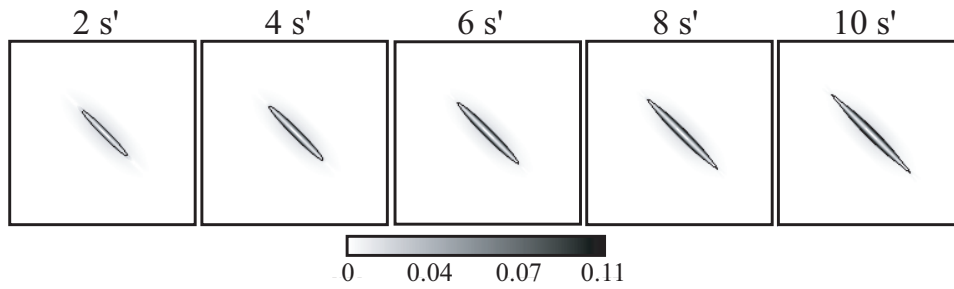


Fig.6.4 Distributions of equivalent plastic strain during non-thermoelastic growth of martensite phase (V1).

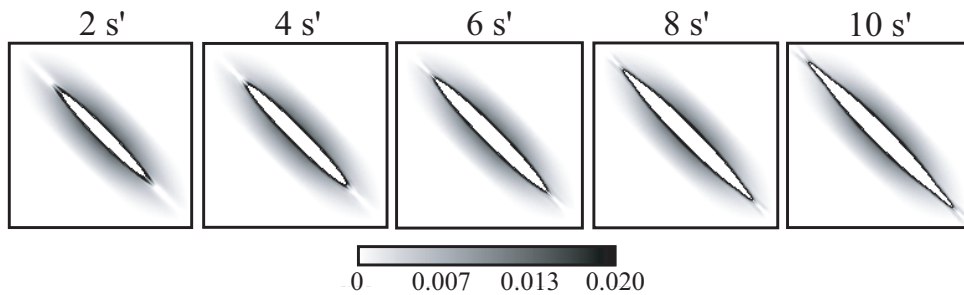


Fig.6.5 Magnified figures of distribution of equivalent plastic strain in parent phase during non-thermoelastic growth of martensite phase (V1).

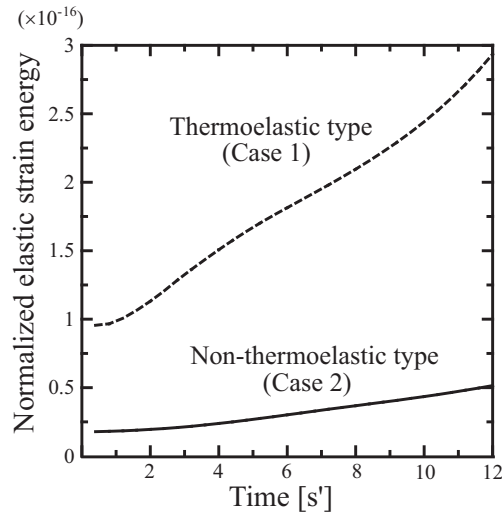


Fig.6.6 Normalized elastic strain energy during thermoelastic and non-thermoelastic growth of martensite phase (V1).

イト変態 (Case 2) の場合は, 塑性変形によって変態ひずみを緩和できるため, マルテンサイト相周囲の応力が大きく減少していることがわかる. このときの相当塑性ひずみの発展を図 6.4 に示す. マルテンサイト相の降伏応力の方が大きいにもかかわらず, マルテンサイト相でも塑性変形が生じ, マルテンサイト/母相界面近傍に塑性ひずみが集中していることがわかる. さらに, 母相での塑性変形挙動を明確に示すために, 母相内のみの塑性ひずみの分布を図 6.5 に拡大して示す. この結果からも, マルテンサイト変態による変態ひずみを緩和するために母相で塑性変形し, マルテンサイト相の周囲に実験でも観察されるような塑性変形領域が形成されていることが確認できる⁽¹⁷⁵⁾.

図 6.6 に, 図 6.3(a), (b) に示したマルテンサイト相の成長による弾性ひずみエネルギーの時間変化を示す. この結果から, 非熱弾性マルテンサイト変態においては, 変態中に PA が生じることによって応力場が大きく緩和されるため, 弾性ひずみエネルギーが大幅に減少していることがわかる. さらに, 図 6.3(a) と (b) のマルテンサイト相の成長量を比べると, 非熱弾性型マルテンサイト変態においては, PA により塑性変形を生じることで, マルテンサイト相が成長する駆動力の一部となる弾性ひずみエネルギーが失われるため, マルテンサイト相の成長が抑制されている. このような PA による塑性変形によってマルテンサイト/母相界面の移動速度が低下し, マルテンサイト相が成長できなくなると, 新たなマルテンサイト相の核形成, 成長が支配的な変態が進行するようになり, マルテンサイト組織がプレート形態からラス形態に変化する一因となることが考えられる^(171, 176).

6.3.2 マルテンサイト組織形成過程に及ぼす自己緩和と塑性緩和の影響

本節では, PA および SA を伴うマルテンサイト変態の数値シミュレーションを行い, ひずみ緩和挙動がマルテンサイト組織形成過程に及ぼす影響を検討する. 図 6.7(a) に熱弾性マルテンサイト変態 (Case 1) によるマルテンサイト組織形成過程を示す. ここで図中, 白色, 黒色, 灰色の領域が, それぞれ母相, マルテンサイト相の V1 および V2 を表している. この結果が示すように, 熱弾性マルテンサイト変態における組織形成過

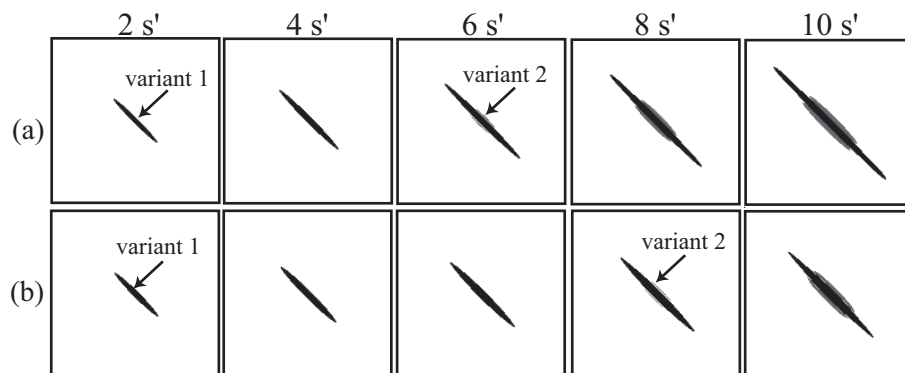


Fig.6.7 Formations of martensitic microstructure consisting of variant 1 (black domain) and variant 2 (gray domain) of martensite phase during (a) thermoelastic and (b) non-thermoelastic martensitic transformations.

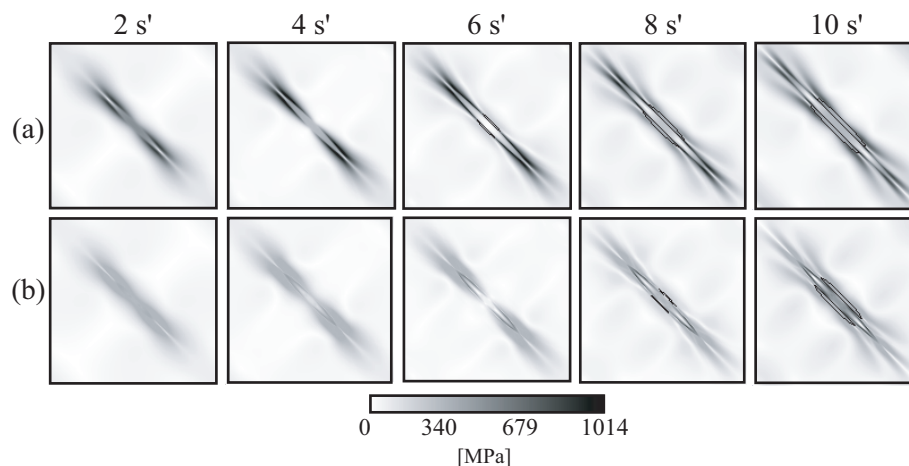


Fig.6.8 Distribution of equivalent stress during evolution of martensitic microstructure by (a) thermoelastic and (b) non-thermoelastic martensitic transformations. Black solid line indicates profile of $\phi_2 = 0.6$ (variant 2).

程では, 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, SA が生じることにより, 初期に形成した V1 のマルテンサイト相がある大きさまでに成長したところで, V1 に平行に V2 の自己緩和バリエントが形成していることがわかる. このときの相当応力分布を図 6.8(a) に示す. SA により V2 が形成されることで V1 の周囲に生じていた応力場が緩和していることが確認できる.

一方, 非熱弾性マルテンサイト変態 (Case 2) によるマルテンサイト組織形成過程を図 6.7(b) に, これに伴う相当塑性ひずみ分布の変化を図 6.9 に示す. 図 6.9 中の実線 ($\phi_2 = 0.6$) は, SA で形成される自己緩和バリエントを表しているが, 自己緩和バリエント

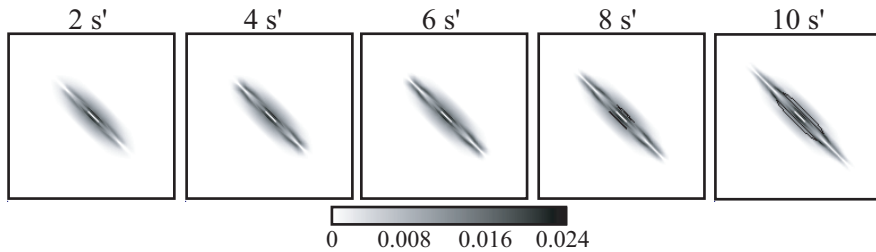


Fig.6.9 Distribution of equivalent plastic strain during evolution of martensitic microstructure by non-thermoelastic martensitic transformation. Black solid line indicates profile of $\phi_2 = 0.6$ (variant 2).

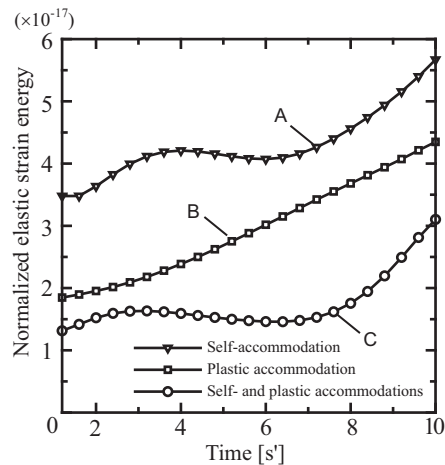


Fig.6.10 Normalized elastic strain energy during martensitic transformation with (A) only SA (Fig. 6.7(a)), (B) only PA (Fig. 6.3(b)) and (C) SA and PA (Fig. 6.7(b)).

がV1の形成によって塑性変形した母相に形成されることがわかる。また、図6.8(b)に示すように、SAによってV2が形成される前に、塑性変形によって応力場が緩和し、SAの駆動力となる弾性ひずみエネルギーが大きく減少するため、SAによる自己緩和バリエーションの形成が遅れている。実際に、マルテンサイト組織内にはマルテンサイト変態によって生じた転位などの格子欠陥が多数導入されているのが観察される。本シミュレーション結果より、こうしたマルテンサイト組織内の結晶欠陥は、変態ひずみを緩和するためにマルテンサイト相および母相が塑性変形し、塑性変形した母相に新たにマルテンサイト相が形成される過程を経て導入されていることが確認できる⁽¹⁷⁷⁾。

さらに、SAとPAによる弾性ひずみエネルギーの最小化過程を明らかにするために、図6.10に、図6.7(a)、図6.3(b)および図6.7(b)で示したマルテンサイト組織の形成に伴う弾性ひずみエネルギーの変化を示す。この結果より、SAが生じる系では自己緩和バリエーションが形成した際に、弾性ひずみエネルギーが減少していることが確認できるが、SAとPAが作用する非熱弾性マルテンサイト変態における弾性ひずみエネルギーが最も小さくなっていることがわかる。したがって、ラスマルテンサイト組織形成のようなSAとPAがともに生じるマルテンサイト組織形成過程においては、PAが変態ひずみを大きく緩和する重要な役割を果たしていることが示唆される。

6.4 多結晶母相におけるマルテンサイト変態挙動

次に本節では、多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションを行い、PAとSAによるひずみ緩和挙動や母相粒間の弾性相互作用が、マルテンサイト組織形成過程に及ぼす影響を明らかにする。

6.4.1 母相粒間の弾性相互作用ならびに応力緩和挙動の影響評価

図6.11(a), (b)にそれぞれ、多結晶母相における熱弾性マルテンサイト変態(Case 1)と非熱弾性マルテンサイト変態(Case 2)による、マルテンサイト組織形成過程を示す。図中、黒色、灰色、白色の領域がそれぞれ母相、マルテンサイト相のV1およびV2を表している。どちらの結果も共通して、粒界近傍に分布させた塑性ひずみによって生じる応力場に誘起されてマルテンサイト相が形成している。このとき、母相が多結晶構造であるため、母相粒間の弾性相互作用によって粒界三重点で応力集中が生じ、そこから優先的にマルテンサイト相が形成していることがわかる。そして、このようにして初期

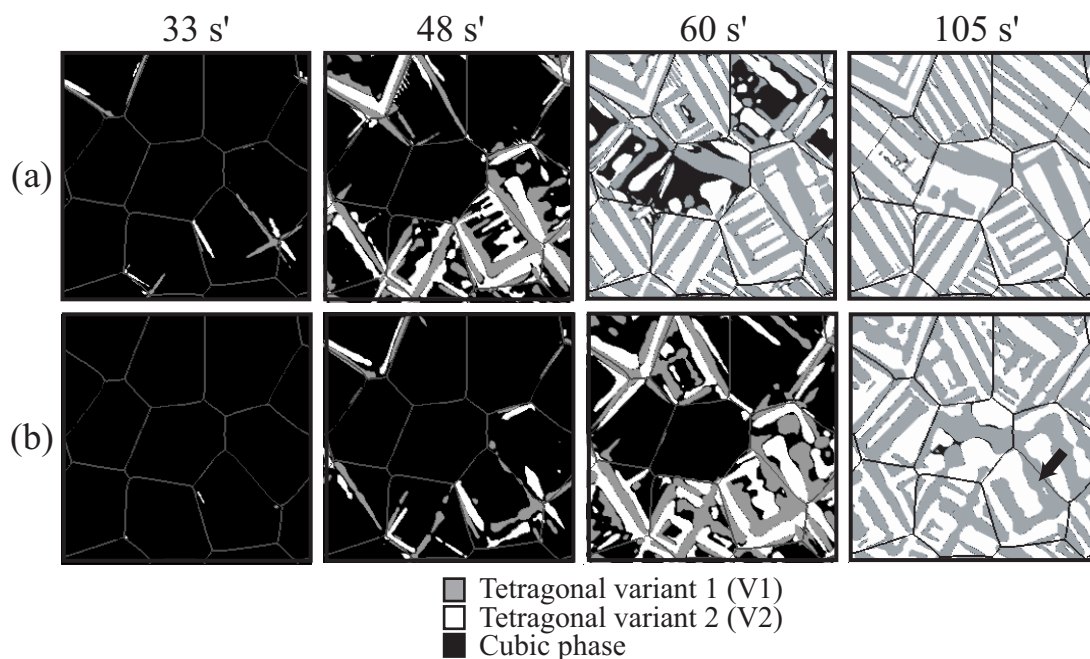


Fig.6.11 Evolutions of martensite phase during (a) thermoelastic (Case 1) and (b) non-thermoelastic (Case 2) martensitic transformations. Black solid line indicates grain boundary between parent cubic phases.

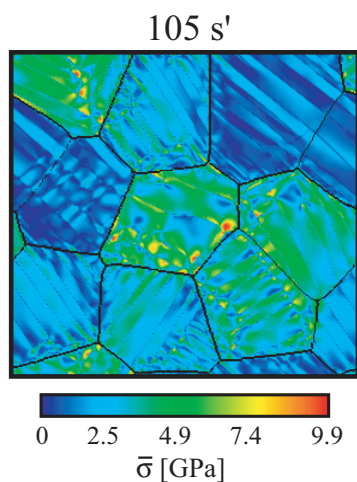


Fig.6.12 Distribution of equivalent stress in martensitic microstructure formed by thermoelastic martensitic transformation (Case 1).

段階で形成されたマルテンサイト相の周囲には、変態ひずみによって応力場が生じるので、その応力場に誘起されて新たなバリエントが次々と形成していくことでマルテ

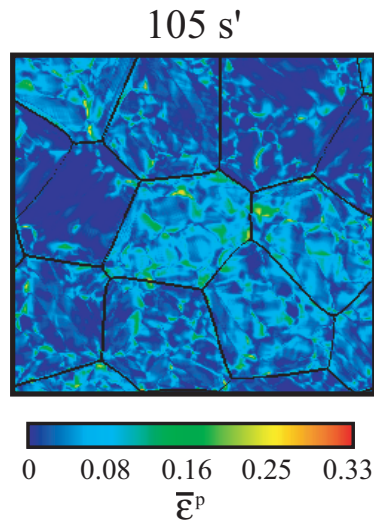


Fig.6.13 Distribution of equivalent plastic strain in martensitic microstructure formed by non-thermoelastic martensitic transformation (Case 2).

ンサイト組織が形成される様子がみてとれる。このようなマルテンサイト相の組織形成過程は、自己触媒効果 (Autocatalytic effect)⁽¹⁷⁴⁾ と呼ばれており、本解析においてもマルテンサイト組織の形成過程を支配する重要な現象であることがわかる。

さらに、緒言で述べたように、マルテンサイト相の組織形態は弾性ひずみエネルギー最小の条件に支配され、変態ひずみが SA のみによって緩和される場合には、各母粒内で形状記憶合金の内部組織として観察されるような V1 と V2 が交互に並んだ層状 (ラメラ) 組織が形成されている⁽¹⁷⁸⁾。ここで、図 6.11(b) に示した 105 s' での、組織内部の相当応力分布を図 6.12 に示す。組織内部の応力分布は母相粒間の方位差にも依存するが、V1 と V2 が一方向に交互に並んだ粒において、応力場がより緩和される傾向があることが確認できる。

一方、非熱弾性マルテンサイト変態においては、マルテンサイト変態で生じる変態ひずみを緩和するために、図 6.13 に示すように、組織全体で塑性変形が生じる。したがって、前節でも述べたように、SA が生じる前に PA によって弾性ひずみエネルギーが減少すれば、SA の駆動力の一部が失われるため自己緩和バリエーションの形成が抑制される。その結果、組織発展が遅くなり、図 6.11(b) において矢印で示したように、PA による塑性変形が集中した領域においては、マルテンサイト相のラメラ組織が粗大になっていることがわかる。

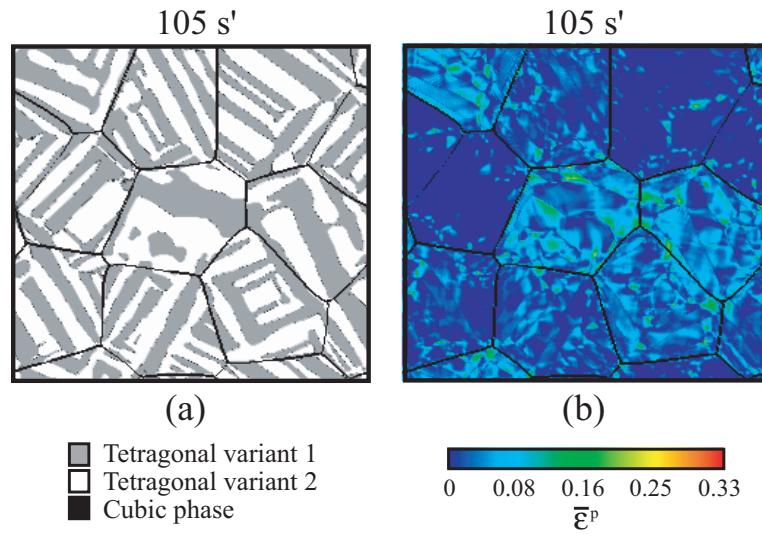


Fig.6.14 Distribution of (a) variants of martensite phase and (b) equivalent plastic strain produced by CT transformation (Case 3). Black solid line in figures indicates grain boundary between parent grains.

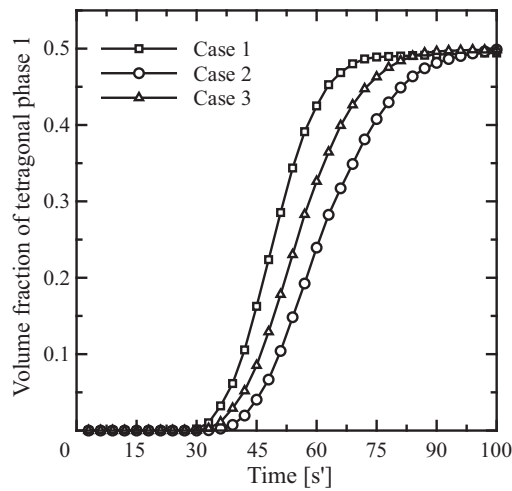


Fig.6.15 Changes of volume fractions of martensite phase (V1) in Cases 1 ~ 3.

6.4.2 母相およびマルテンサイト相の降伏応力の影響

本節では、SA および PA によるひずみ緩和挙動が、マルテンサイト組織形態に及ぼす影響をさらに明らかにするために、Case 3 の降伏応力を用いて、マルテンサイト変態の数値シミュレーションを行った。その結果得られた、105 s' でのマルテンサイト組織

形態および組織内部の塑性ひずみ分布を、それぞれ図 6.14(a) および (b) に示す。Case 2 の降伏応力を用いた解析結果である図 6.13 と比べると、母相およびマルテンサイト相の塑性変形抵抗が増したことにより、塑性変形が生じにくくなり、組織内部の塑性ひずみが減少していることがわかる。そのため、Case 3 では SA によってひずみが緩和される程度が増し、V1 と V2 の層状組織の分布が明瞭になることが分かる。また、Case 1 ~ 3 の降伏応力を用いて、多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションを行って得られた、マルテンサイト相 (V1) の体積分率変化を図 6.15 に示す。母相およびマルテンサイト相の塑性変形抵抗が大きくなるほど、マルテンサイト変態は熱弾性的になり、変態速度が大きくなることがわかる。

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 Phase-Field モデルを用いることで、マルテンサイト変態中の SA および PA によるひずみ緩和挙動のみならず、PA と SA のバランスで特徴づけられるマルテンサイト変態挙動や組織形態の変化を再現可能であることがわかる。

6.5 結言

本章では、第 2 章 4 節で導出した、SA および PA が生じるマルテンサイト変態を表現する弾塑性 Phase-Field モデルを用いて、立方晶から正方晶へのマルテンサイト変態による組織形成過程の 2 次元シミュレーションを行った。そして、一連の数値シミュレーションを通じて SA、PA の両ひずみ緩和機構がマルテンサイト変態挙動および組織形態に及ぼす影響を詳細に検討した。以下に、本章で得られた結果をまとめる。

はじめに、単結晶母相におけるマルテンサイト組織形成過程を再現し、PA および SA によるひずみ緩和挙動を検討したところ、PA が生じうる非熱弾性マルテンサイト変態では、変態ひずみを緩和するためにマルテンサイト相および母相において塑性変形が生じるとともに、先に形成したマルテンサイト相近傍の塑性変形した母相で、自己緩和バリエーションが形成した。このような組織形成過程を経て、実験で観察されるようなマルテンサイト組織内部の結晶欠陥が導入されることが示唆される。また、PA によって先に形成したマルテンサイト相周囲の応力場が緩和され、SA の駆動力となる弾性ひずみエネルギーが大きく減少すると、自己緩和バリエーションの形成が遅れることが示された。さらに、マルテンサイト変態に伴う弾性ひずみエネルギーの変化を評価した結果、PA および SA が作用する非熱弾性マルテンサイト変態で生じる弾性ひずみエネルギーが

最も小さくなり、ラスマルテンサイト組織形成においては、PA が変態ひずみを大きく緩和する重要な役割を果たしていることを示唆する結果となった。

ついで、多結晶母相におけるマルテンサイト変態の数値シミュレーションを行い、母相粒間の弾性相互作用やPA, SA によるひずみ緩和挙動がマルテンサイト組織形成過程に及ぼす影響を検討した。その結果、母相が多結晶構造をなす場合、母相粒間の弾性相互作用によって粒界三重点で応力集中が生じ、そこから優先的にマルテンサイト相が形成しうることが示された。また、本研究で構築したマルテンサイト変態の Phase-Field モデルを用いることで、多結晶母相における熱弾性マルテンサイト変態により、各母粒内に形状記憶合金の内部組織として観察されるような V1 と V2 が交互に並んだ層状組織が形成される過程や、非熱弾性マルテンサイト変態では、PA と SA のバランスに依存して、マルテンサイト組織形態が特徴づけられることを再現することができる。

第7章

拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程のモデル化

7.1 緒言

金属材料における相変態は温度依存性が強く、原子のランダムジャンプが頻繁に生じる高温領域では、原子の長距離拡散に支配される拡散変態が生じる。一方、温度が低下するに従って原子の拡散は著しく遅くなるため拡散変態が困難となるが、変態駆動力は増加する。そして、過冷度が大きくなり、原子の集団的な移動が可能なほどに変態駆動力が大きくなると、前節で示したような変態ひずみが生じる無拡散変態、すなわちマルテンサイト変態が発生する。また、鉄鋼材料をはじめとする合金では温度のみならず、溶質原子の濃度にも依存して変態挙動が変化する。したがって、拡散変態と無拡散変態が生じる温度の中間温度領域において合金内に相変態が生じた場合、合金の初期濃度だけでなく変態中の濃度変化にも依存して変態機構が変化し、合金内部で拡散変態と無拡散変態の両方が同時に進行する極めて複雑な相変態挙動を示すと考えられる。

実際、鉄鋼材料においては、フェライト変態やパーライト変態などの拡散変態が生じる温度とマルテンサイト変態が生じる温度の中間温度域において、拡散変態と無拡散変態の両方の性質を合わせ持つベイナイト変態が生じる^(13, 14, 15)。この変態で形成されるベイナイト組織は、優れた強度と靱性を兼ね備えているため、その変態挙動や組織形成過程を明らかにしようと研究が盛んに行われている^(179, 180)。しかしながら、先に述べたようにベイナイト変態は、拡散変態と無拡散変態の両方の性質を合わせ持つため、実験的手法のみを用いて変態機構を明らかにすることは難しく、未だ完全には解明されていないようである。したがって、ベイナイト変態のような拡散変態と無拡散変態

の両方が同時に進行する相変態 (以後, これを競合変態と呼ぶことにする) 挙動を統一的に取り扱える数理モデルを構築し, それを用いて数値シミュレーションを可能とすれば, 競合変態による組織形成過程の系統的な理解を進めるための強力な数値解析手法となりうる.

そこで, 本章では Phase-Field 法を用いて競合変態をモデル化し, 競合変態による組織形成過程の数値シミュレーションを実施することを試みる. 本研究では競合変態の Phase-Field モデルを構築することを目的とするため, 材料を特定せず, 拡散変態として Fe-Cr 系合金や Fe-Cu 系合金で見られるようなスピノーダル分解^(181, 182, 183) と, 前節で示したマルテンサイト変態が同時に進行するモデル合金 AB の等温変態を解析対象とする. はじめに, 母相である立方晶でのスピノーダル分解と, 正方晶 (マルテンサイト相) へのマルテンサイト変態を統一的に取り扱うことのできる Phase-Field モデルを示した後, 合金 AB における競合変態挙動に及ぼす, 初期濃度の影響を検討する.

7.2 競合変態の Phase-Field モデル

Phase-Field 法による競合変態のモデル化は, 第2章に示した, 各エネルギー評価法を任意に組み合わせることで可能である. 本節では, 第2章4節で示した無拡散変態の Phase-Field モデルを基礎に, 溶質原子 B の濃度場を表す秩序変数を追加することによって, 母相のスピノーダル分解とマルテンサイト変態による新相形成が同時に進行する競合変態のモデル化を試みる. なお, 以下では競合変態の Phase-Field モデルの全体像を説明するが, 各種エネルギーの評価法の詳細な説明は省略する.

本モデルにおける秩序変数として, マルテンサイト相の i ($i = 1, 2, 3$) 番目のバリエーションの存在確率を表す ϕ_i と溶質原子 B の濃度を表す濃度場 c を定義する. これらの秩序変数を用いて, 系の全自由エネルギー G は, 式 (2.1) に示したような Gibbs の自由エネルギー汎関数で表すことができる.

$$G = \int_V \left(g_{ch} + g_{el} + \frac{\kappa_c}{2} |\nabla c|^2 + \frac{\kappa_\phi}{2} \sum_{i=1}^3 |\nabla \phi_i|^2 \right) dV \quad (7.1)$$

ここで, 上式の第3項と第4項は ϕ_i と c の不均一性に起因する勾配エネルギーである. また, 第1項の g_{ch} は化学的自由エネルギー密度であり, 本モデルでは ϕ_i と c の Landau 多項展開式を用いて次式で表すことにする⁽¹⁸⁴⁾.

$$g_{ch} = \frac{A}{4} (c - c_\alpha)^2 (c - c_1)^2 + \frac{B}{2} (c - c_1)^2$$

$$+ \frac{C}{2}(c - c_p) \sum_{p=1}^3 \phi_p^2 - \frac{D}{3} \sum_{p=1}^3 \phi_p^3 + \frac{E}{4} \left(\sum_{p=1}^3 \phi_p^2 \right)^2 \quad (7.2)$$

ここで、 A, B, C, D, E は Landau 多項展開式の展開係数、 c_α と c_1 はそれぞれマルテンサイト相および母相の平衡組成に関する定数、 c_p は母相が準安定状態になる濃度に関する定数である。これらの展開係数や定数は、鉄鋼材料や合金を解析対象とする際には、式 (7.2) と実験や CALPHAD 法等で得られる化学的自由エネルギー関数とのフィッティングによって決定することができる。

次に、式 (7.1) の第 2 項 g_{el} は弾性ひずみエネルギー密度であり、第 2 章 4 節で示した Micromechanics 理論に基づく、Phase-Field Microelasticity 理論を用いて評価する。したがって、弾性ひずみエネルギー密度 g_{el} は、式 (2.130) と同様に次式で表される。

$$g_{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} (\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0) (\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0) \quad (7.3)$$

ここで、固有ひずみ ϵ_{ij}^0 は、式 (2.147) で示したように、マルテンサイト相の各バリエーションの形成によって生じる変態ひずみ ϵ_{ij}^{00} の和として、式 (6.1) と同様に次式で表される。

$$\epsilon_{ij}^0 = \sum_{m=1}^3 \epsilon_{ij}^{00}(m) \phi_m \quad (7.4)$$

以上より、系の全自由エネルギー G を評価できるので、秩序変数の時間発展方程式は、前節まで示した Phase-Field モデル同様に、次式に示すような時間発展方程式に式 (7.1) を代入することで得ることができる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M_c \nabla \left(\frac{\delta G}{\delta c} \right) \right\} \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \left(\frac{\delta G}{\delta \phi} \right) \quad (7.6)$$

7.3 解析モデルと解析条件

本研究では、 AB_2 元合金を母相とマルテンサイト相の 2 相共存温度領域に等温保持した際に生じる、競合変態の数値シミュレーションを行い、B 原子の初期濃度 c_0 すなわち過飽和度が競合変態挙動および組織形成過程に及ぼす影響を検討する。なお、ここでは前節と同様に、平面ひずみ状態を仮定し、2 次元空間において時間発展方程式 (7.5) と式 (7.6) を差分法を用いて数値解析する。

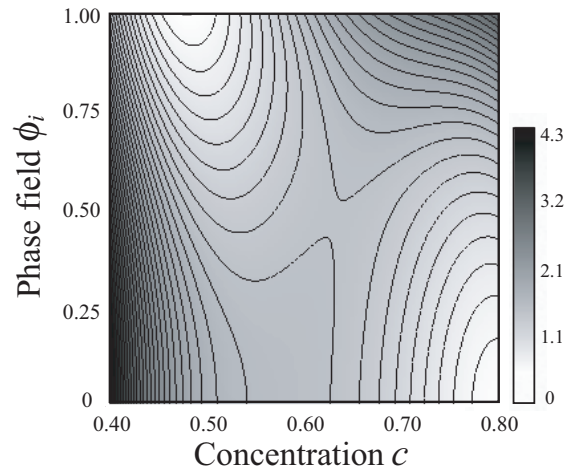


Fig.7.1 Contour map of chemical free energy density.

解析領域は、 $DX = DY = 0.512 \times 0.512 \mu\text{m}^2$ の正方形領域であり、 256×256 の差分格子で規則分割する。そして、紙面を母相 (001) 面とし、解析領域の x, y 方向をそれぞれ母相の [100], [010] 軸方向に一致させる。したがって、紙面手前方向が [001] 方向に対応する。また、本研究では均一核形成を仮定し、初期状態において解析領域全体に、一様乱数を用いて 0.01 以下の ϕ_1, ϕ_2 を分布させる。初期濃度 c_0 は種々に変化させてシミュレーションを行うが、初期状態において濃度場に一様乱数を用いて微小な揺らぎを与えている。

さらに、式 (7.2) の化学的自由エネルギー密度の各係数および定数は、先に述べたような実験や CALPHAD 法で得られる化学的自由エネルギー関数とのフィッティングは行わず、モデルパラメーターとして次の値を用いる⁽¹⁸⁴⁾: $A = 5062.85$, $B = 32.06$, $C = 29.45$, $D = 6.70$, $E = 8.47$, $c_\alpha = 0.5$, $c_1 = 0.8$, $c_p = 0.59$ 。このとき、式 (7.2) の化学的自由エネルギー密度は、秩序変数 ϕ_i と c に対して図 7.1 に示すような変化を示す。すなわち、平衡状態においては母相の方がマルテンサイト相よりも B 原子を多く固溶することができる。

また、AB₂ 元合金は等方弾性体であると仮定し、その弾性係数を $C_{11} = 140$, $C_{44} = 28$, $C_{12} = 84$ GPa とした⁽¹⁶⁶⁾。式 (7.5) と式 (7.6) のモビリティは、 $M_\phi = 1$, $M_c = 3.5 \times 10^{-16} \text{ m}^2/\text{s}$ を用いる。また、式 (7.1) の勾配エネルギー係数は、 $\kappa_\phi = 3.0 \times 10^{-11} \text{ Jm}^2/\text{mol}$, $\kappa_c = 1.0 \times 10^{-8} \text{ Jm}^2/\text{mol}$ とする。

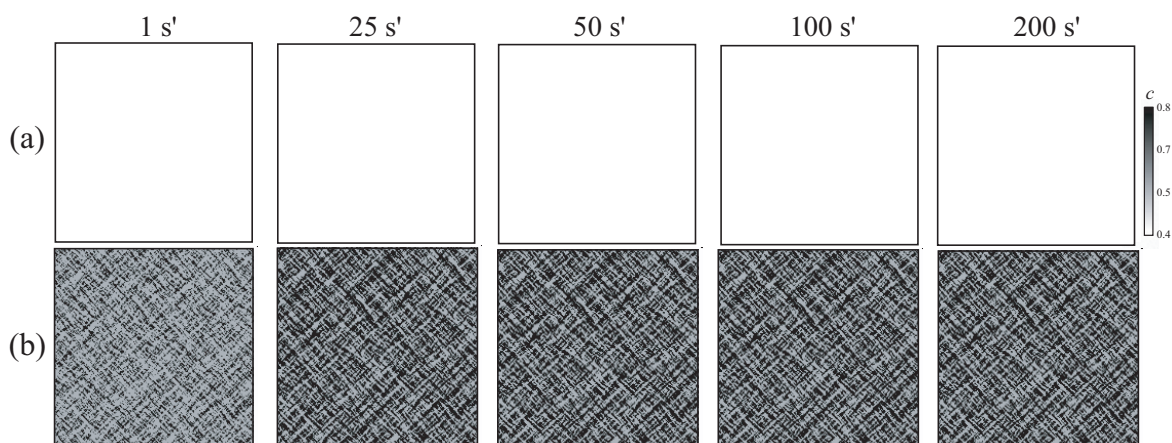


Fig.7.2 Evolutions of (a) concentration and (b) microstructure of martensite phase during competitive transformation for initial concentration $c_0 = 0.4$.

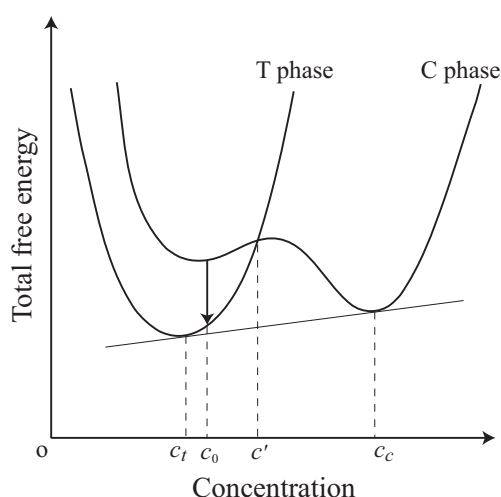


Fig.7.3 Illustration of dissipation of free energy during martensitic transformation.

7.4 競合変態による組織形成過程の濃度依存性

本節では、初期濃度 c_0 を種々に変化させた AB₂ 元合金の等温保持における競合変態を再現し、初期濃度や変態中の濃度変化に依存した組織形成過程を明らかにする。なお、以下に示す組織形成過程の図においては、白色、黒色、灰色の領域が、それぞれ母相および母相の [100] 方向、[010] 方向と平行な c 軸を持つバリエント 1 とバリエント 2 のマルテンサイト相に対応している。

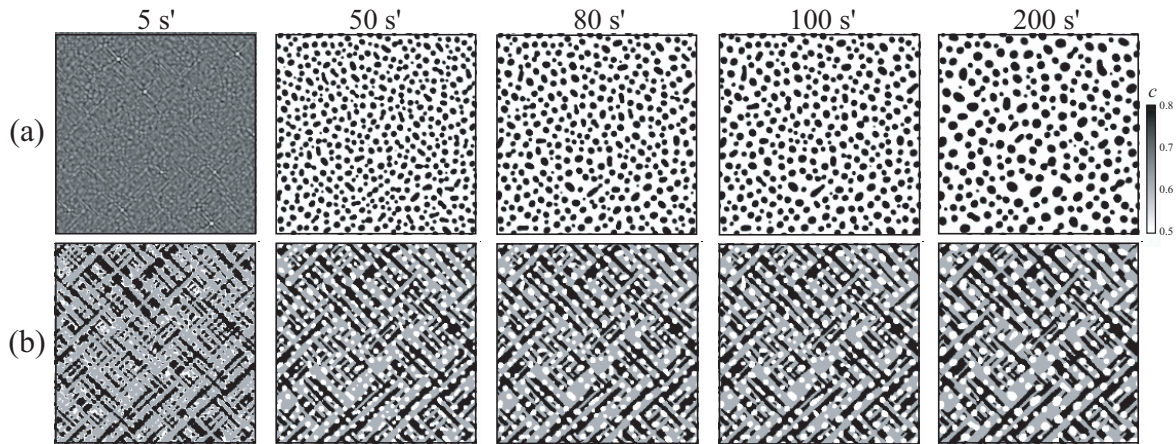


Fig.7.4 Evolutions of (a) concentration and (b) microstructure of martensite and parent phases during competitive transformation for initial concentration $c_0 = 0.56$.

図 7.2 に、初期濃度 $c_0 = 0.4$ の AB2 元合金における競合変態による濃度変化および組織形成過程を示す。この結果より、等温保持後すぐにマルテンサイト変態が生じて、安定相のマルテンサイト相を形成していることがわかる。ここで、スピノーダル分解が生じる母相と安定相であるマルテンサイト相の自由エネルギー曲線の模式図を図 7.3 に示す。マルテンサイト変態は、通常マルテンサイト相の自由エネルギーが母相よりも低くなる c' 以下の濃度において生じうるが、変態によって生じる弾性ひずみエネルギーを超える大きな変態駆動力が必要であるので、過飽和度の大きな初期濃度においてのみマルテンサイト変態が可能である。また、マルテンサイト変態によって新相が形成される場合、自由エネルギーは図 7.3 の矢印で示すように変化する。マルテンサイト変態は、拡散変態に比べて変態速度が非常に速いため、この変態駆動力のほとんどがマルテンサイト変態によって消費される。したがって、拡散変態すなわち母相のスピノーダル分解やマルテンサイト相から母相への B 原子の拡散は生じず、濃度変化が発生することなく母相からマルテンサイト相へと相変態していることが確認できる。

次に、初期濃度 $c_0 = 0.56$ の AB2 元合金における競合変態による濃度変化および組織形成過程を図 7.4 に示す。この場合も変態開始後の初期段階で、マルテンサイト変態が先に生じている。しかしながら、図 7.2 に示した結果よりも過飽和度が小さく、マルテンサイト相への変態駆動力が小さくなるため、母相のスピノーダル分解を同時に生じることで自由エネルギーを減少させている。このとき、スピノーダル分解とともに、マルテンサイト相で固溶できない B 原子が母相へと拡散するため、母相で濃度が増加

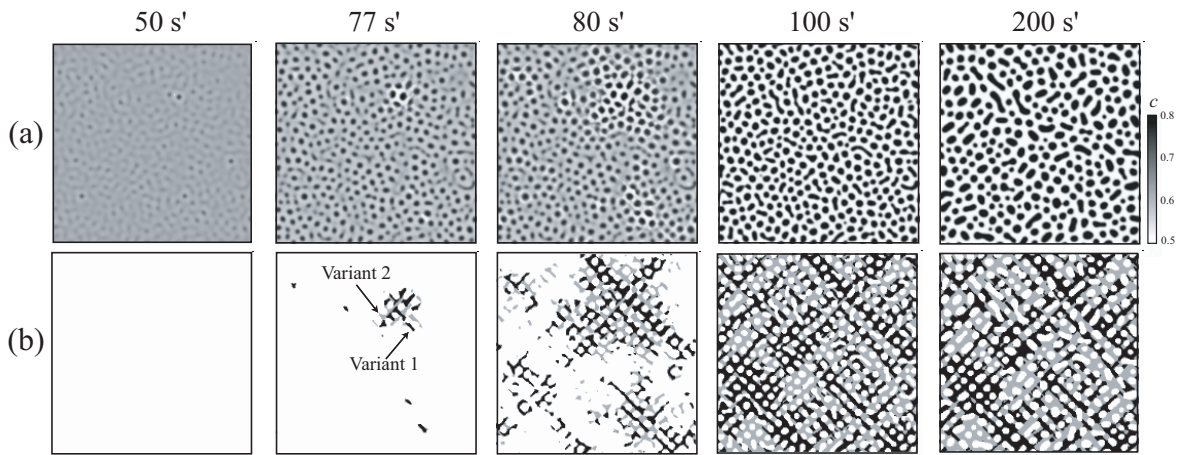


Fig.7.5 Evolutions of (a) concentration and (b) microstructure of tetragonal and cubic phases during competitive transformation for initial concentration $c_0 = 0.6$.

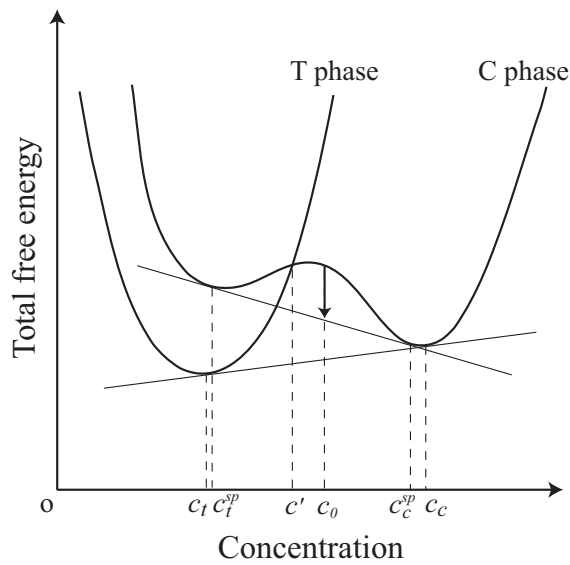


Fig.7.6 Illustration of dissipation of chemical free energy during spinodal decomposition of cubic phase.

する。これにより、図 7.3 に示した c' よりも B 原子の濃度高くなった母相では、マルテンサイト変態が生じないことが示されている。よって、変態開始後 50 s' にはマルテンサイト相と母相の 2 相混合組織が形成している。その後は、時間が経過するにつれて、組織全体の界面エネルギーを下げるように、高濃度の母相がオストワルド成長⁽¹⁸⁵⁾ し、粗大化していく様子が見て取れる。

さらに, 図 7.5 に, 初期濃度 $c_0 = 0.6$ の場合の競合変態のシミュレーション結果を示す. 過飽和度がさらに小さくなると, 図 7.5 (b) の 50 s' に示す結果から分かるように, この初期濃度ではマルテンサイト変態が生じないことがわかる. このことから, 図 7.6 に示すように, c_0 は c' よりも大きい値であると考えられる. しかし, その一方で, 図 7.5(a) を見ると, B 原子を過飽和に固溶した母相の高いエネルギー状態をいち早く緩和させるために, 母相のスピノーダル分解が先に生じていることが確認できる⁽¹⁸⁶⁾. このとき, 母相内の濃度は c_0 から図中 c_t^{sp} および c_c^{sp} へと変化していく. そして, このスピノーダル分解に伴う濃度変化によって, c' よりも濃度が小さくなった母相において, マルテンサイト変態が発生することがわかる (図 7.5(b) の 77 s'). さらに, マルテンサイト相は, 母相へ B 原子を排出するため, マルテンサイト相が形成した領域では濃度が減少していることが確認できる. そして, その後は時間の経過とともに, 母相の粗大化とマルテンサイト相の形成が同時進行して, 母相とマルテンサイト相の 2 相混合組織が形成されていく様子が再現されている.

7.5 結言

本章では, 鉄鋼材料におけるベイナイト変態のような拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程を再現するために, 拡散変態と無拡散変態を統一的に取り扱うことのできる Phase-Field モデルを構築した. そして, 構築した Phase-Field モデルを用いて, モデル合金 AB の等温保持における, 母相のスピノーダル分解とマルテンサイト変態が同時に生じる競合変態の数値シミュレーションを実施し, 初期濃度の違いが競合変態による組織形成過程に与える影響を明らかにした. その結果, 以下のような知見を得た.

マルテンサイト相の自由エネルギーが母相よりも小さくなる濃度 c' 以下の初期濃度とした場合には, 変態駆動力が大きいため, 等温保持後すぐにマルテンサイト変態が生じて, 濃度変化を生じることなく安定相であるマルテンサイト相の単相組織が形成した. 一方, 初期濃度が増加すると, 過飽和度が小さくなるため, マルテンサイト変態の変態駆動力が小さくなる. したがって, 自由エネルギーを減少させるために, マルテンサイト変態と母相のスピノーダル分解が同時に進行するようになることがわかった. このとき, マルテンサイト相から母相へ溶質原子が拡散することにより, 濃度が c' より高くなった母相では, マルテンサイト相が形成されないことが示された. その結果, B 原

子濃度の低いマルテンサイト相と濃度の高い母相の 2 相混合組織が形成されるとともに、高濃度の母相がオストワルド成長して粗大化する過程が観察された。

さらに、初期濃度が c より大きくなると、マルテンサイト変態するだけの変態駆動力が得られず、初期濃度のままではマルテンサイト相が形成されなくなった。この場合には、B 原子を過飽和に固溶した母相の高いエネルギー状態を速やかに緩和するために、母相においてスピノーダル分解が先に生じ、このスピノーダル分解に伴う B 原子の拡散により、濃度が c よりも小さくなった母相において、マルテンサイト変態が発生することを示した。さらに、その後は時間の経過とともに、母相の粗大化とマルテンサイト相の形成が同時進行し、母相とマルテンサイト相の 2 相混合組織が形成されていく様子が再現可能であることを示した。

以上の結果より、本章にて構築した Phase-Field モデルを用いることによって、拡散変態と無拡散変態の競合変態による組織形成過程を再現可能であることが示された。さらに、本モデルを用いた数値シミュレーションを実施することにより、初期炭素濃度や組織形成過程における溶質拡散による濃度変化に依存した複雑な相変態挙動を、エネルギー論、速度論的な観点から系統的に理解することができた。本研究では、解析対象をモデル合金 AB としたが、式 (7.2) に示した化学的自由エネルギー関数を、実験や CALPHAD 法で得られる化学的自由エネルギーに基づいて決定するだけで、鉄鋼材料や実在の合金を対象とした数値シミュレーションを行うことができる。したがって、本モデルを用いて、Fe-C2 元合金などの鉄鋼材料におけるベイナイト組織形成過程や連続冷却曲線の予測^(187, 188) が可能であると考えられる。

第8章

フェライト-パーライト鋼の材質予測 シミュレーション

8.1 緒言

鉄鋼材料の内部組織は、フェライト、パーライト、ベイナイトおよびマルテンサイトなどの単一組織またはそれら単一組織から構成される複相組織であり、材料の力学特性は各組織の体積分率のみならず、組織形態に依存して変化する。したがって、材質制御を行って、要求される力学特性を有する鉄鋼材料を創製するためには、微視組織形態と力学特性の関係を明らかにし、所望の力学特性を発現させる微視組織形態とそれを形成させるための組織制御方法を決定する必要がある。しかしながら、前章までに示したように、鉄鋼材料における組織形成過程は極めて複雑であり、実験的手法のみを用いて組織制御および材質予測を行うことは容易ではない。このような背景から、本研究の目的としている、数値シミュレーションを援用した鉄鋼材料の材質予測手法の構築が希求されている。

これに対し、近年では有限要素法を用いた数値シミュレーションによって、鉄鋼材料の微視組織形態に基づき巨視的な力学的特性を予測可能にしようとする試みが活発になされている^(189, 190, 191, 192)。これらの研究では、周期的に配列した微視組織を仮定し、その繰り返し単位の一つを組織形態をユニットセルとしてモデル化することにより、微視領域および巨視領域における変形挙動を評価可能にしている。ただし、これらの手法においてはユニットセル内の組織分布は、微視組織の顕微鏡写真に基づいて作成することが多く、異なる条件化で形成される微視組織について評価するためには、その都度実験を行い組織を生成する必要がある。一方、本論文の第3章から第7章では、鉄鋼

材料における相変態組織の形成過程を Phase-Field 法を用いてモデル化し、数値シミュレーションによって各種組織の形成予測を可能とした。これらの Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションでは、解析結果として組織形態を画像データとして得ることが出来る。したがって、その画像データを利用して微視組織形態を陽に考慮した力学特性評価手法を構築すれば、試行錯誤的に試験片を作成する必要がなく、計算機内で組織形成予測と力学特性評価を繰り返し行うことができる。これにより、求める力学特性をもたらす組織形態やその組織制御方法を効率的に探索可能となる。

本章では、前節までに示した Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで得られる組織形態に基づき、鉄鋼材料の力学特性を評価可能な系統的材質予測シミュレーション手法を構築する。ここでは、構築した材質予測手法を用いてフェライト+パーライト 2 相鋼 (FP 鋼) の材質予測シミュレーションを行う。そして、FP 鋼における組織形成予測から力学特性評価までを一貫して行い、本研究で構築した材質予測手法の可能性やその有効性を示す。

FP 鋼の材質予測シミュレーションの流れは、次の通りである。はじめに、第 3 章で示した Phase-Field 法による $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションにより、FP 鋼内部の α 相の形成過程を再現する。次に、第 2 章 5 節で示した均質化法に基づく弾塑性有限要素法 (FEH 法) を用いて FP 鋼の力学特性を評価するために、上記の組織形成シミュレーションで得られた α 相形態を含む、フェライト+パーライト 2 相組織を表現する代表体積要素 (RVE) を作成する。このとき、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態後の組織における未変態 γ 相は、均一なパーライト組織に変化していることを仮定する。そして、FP 鋼の単軸引張り試験の数値シミュレーションを実施し、FP 鋼の巨視的および微視的な変形挙動と微視組織形態の関係を明らかにする。

8.2 解析モデルおよび解析条件

図 8.1 に、FP 鋼の材質予測シミュレーションで用いる解析モデルを示す。本研究では、フェライト+パーライト組織が形成される γ 母相粒が六角形状であると仮定し、それが周期的に配列した材料を解析対象とする。そして、あるひとつの γ 粒内の組織を RVE で表すものとして、そこに形成される α 相の形成過程を Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで再現する。

図 8.1(a) に、Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで用いる、解析モデルを

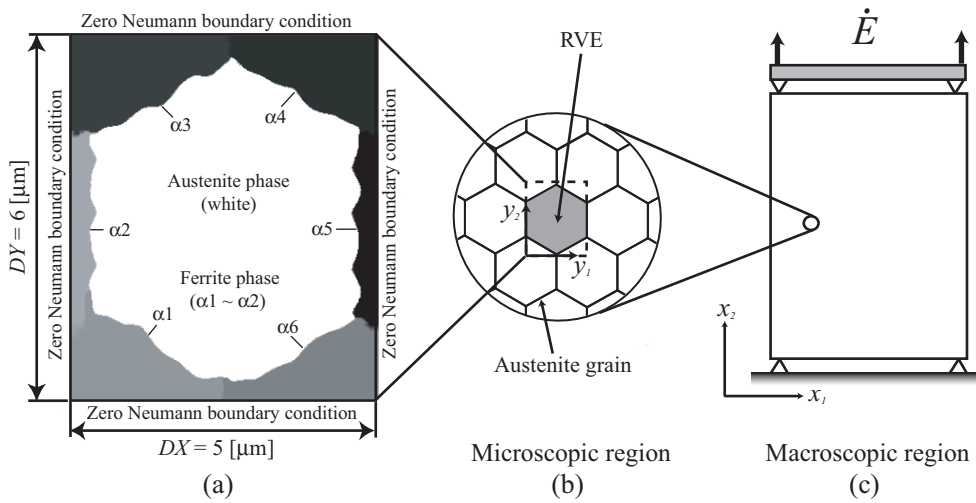


Fig.8.1 Simulation models for (a) Phase-Field simulation and for FEH analysis in (b) microscopic and (c) macroscopic regions.

示す。解析領域は $DX \times DY = 5 \times 6 \mu\text{m}^2$ の長方形領域とする。境界条件は、解析領域全端で零ノイマン条件を適用する。Phase-Field 法では、 α 相の核形成を取り扱えないため、本研究では γ 粒界に α 相が形成した状態を初期状態とし、解析領域内に $\alpha_1 \sim \alpha_6$ で示す 6 つの初期 α 相を配置する。このとき初期 α/γ 界面は、複数の正弦関数を用いて初期不整を与えている。さらに、各初期 α 相には、それぞれ異なった優先成長方向 θ_0 を設定することによって、 α 相の成長方向を表現する。その他の解析条件は第 3 章 4 節と同様であり、温度 $T = 1000 \text{ K}$ 一定、各相の初期炭素濃度は α 相で平衡組成 ($u_c^\alpha = 0.002$)、 γ 相で過飽和状態 ($u_c^\alpha = 0.02$) とする。界面異方性に関する各パラメータは異方性モード数 $k = 2$ 、界面エネルギー $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ を用いる。

一方、図 8.1(b), (c) に、FEH 法による FP 鋼の単軸引張り試験の数値シミュレーションの解析モデルを示す。変形条件は 2 次元平面ひずみ状態のもと、上端面にひずみ速度 $\dot{E} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ となるように変位速度を与える。このとき、材料が一様変形となるように境界条件を与えている。また、先に述べたように本研究では未変態 γ 相である領域は、単軸引張り試験を行う際には均一なパーライト組織に変化しているものとして、各相の物性値を与える。実際には、パーライト組織の変形挙動はパーライト組織を構成するラメラの間隔に依存するが、 α 相組織のサイズに比べて、ラメラ間隔は極めて小さいことから、その影響を無視できるものとして均一なパーライト組織としている。さらに、 α 相とパーライト組織のそれぞれの応力-ひずみ関係は、弾性域では Hooke の法則、

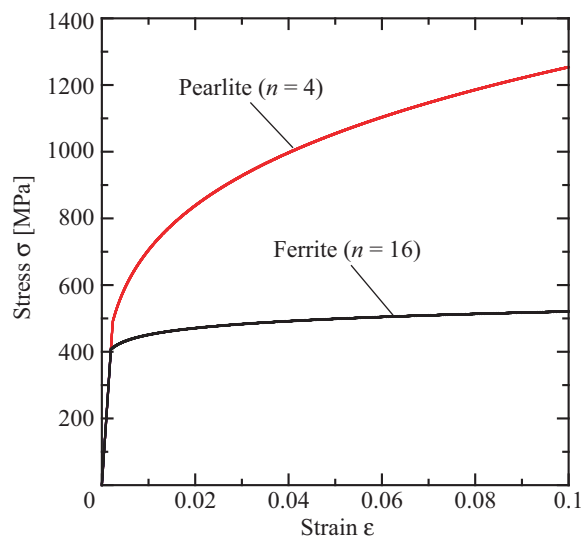


Fig.8.2 Stress-strain curves for ferrite phase and pearlite.

塑性域では次式に従うものとする.

$$\epsilon = \frac{\sigma_y}{E} \left(\frac{\sigma}{\sigma_y} \right)^n \quad (8.1)$$

ここで, σ_y , E , n はそれぞれの組織の降伏応力, ヤング率および加工硬化指数である. α 相およびパーライト組織の降伏応力は, それぞれ $\sigma_y^\alpha = 409$ MPa, $\sigma_y^P = 490$ MPa, ヤング率とポアソン比は両相ともそれぞれ $E = 206$ GPa, $\nu = 0.3$ としている⁽¹⁹³⁾. α 相およびパーライト組織の加工硬化指数は, それぞれ $n = 16$, $n = 4$ を仮定する. このとき, 両相の応力-ひずみ関係は, 図 8.2 に示すようになる.

8.3 γ 粒内のフェライト相形成予測

本節では, 第 3 章 4 節で示した $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の Phase-Field シミュレーションを行い, γ 粒内の α 相の形成過程を予測する. そして, その結果に基づき FP 鋼内のフェライト+パーライト組織形態を再現する, RVE を作成する.

図 8.3 に, 式 (2.33) と式 (2.34) において異方性強度 $\xi = 0.1$ を用いて, $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の Phase-Field シミュレーションを行うことで得られた, α 相の形成過程を示す. ここで, $\alpha_1 \sim \alpha_6$ の α 相の優先成長方向 $\theta_0^1 \sim \theta_0^6$ は, それぞれ 40° , 25° , 220° , 220° , 155° および 60° とした. 図 8.3 (d) 中の実線が, $\phi = 0.5$ で定義された初期 α/γ 界面位置であ

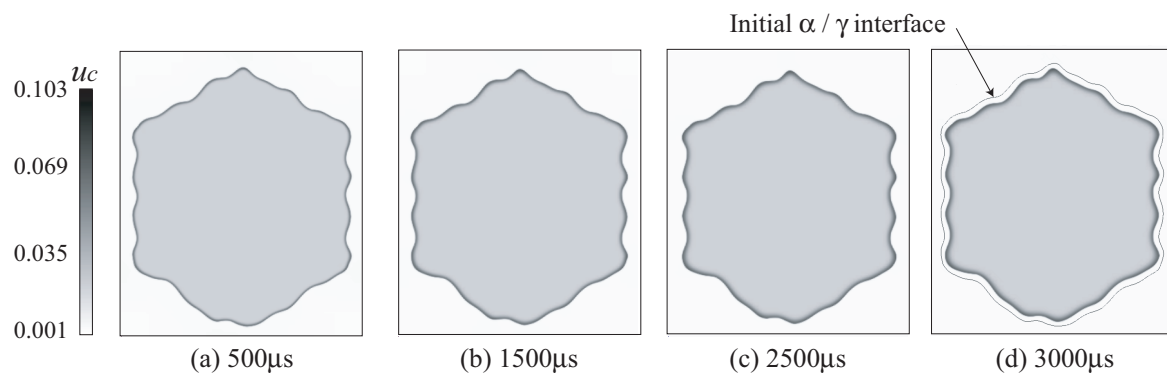


Fig.8.3 Distributions of carbon concentration during evolution of Allotriomorph ferrite for $\xi = 0.1$.

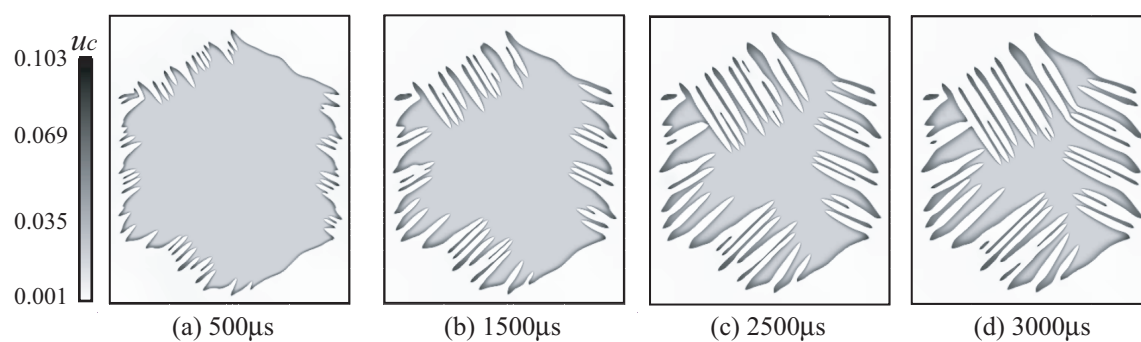


Fig.8.4 Distributions of carbon concentration during evolution of fine-grained Widmanstätten ferrite plates for $\xi = 0.5$.

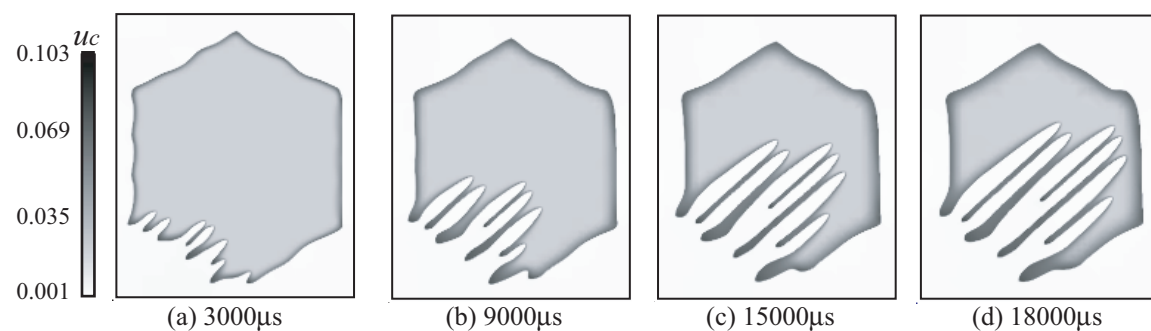


Fig.8.5 Distributions of carbon concentration during evolution of coarse-grained Widmanstätten ferrite plates for $\xi = 0.35$.

るが、第3章4節で述べたように、界面エネルギーの異方性が小さい場合、 α 相は粒界 Allotriomorph フェライト (α_G) の形態を呈して、 γ 粒内へと成長している。

一方、図8.4に、異方性強度 $\xi = 0.5$ における α 相の発展に伴う炭素濃度の変化を示す。異方性強度が大きい場合には、界面エネルギーの方向依存性が大きいので、 α 相の組織形態は組織全体の界面エネルギーを下げるように、多角形状の α_G からプレート形状の Widmanstätten フェライト (α_W) へと組織形態が変化している。そして、時間とともに γ 粒内に微細な α_W が形成されていることがわかる。

Huangらは γ 粒内に粗大な α_W が形成されると、FP鋼の靱性が低下することを実験によって指摘している⁽¹⁹⁴⁾。本研究では、このような α 相の形態に依存したFP鋼の力学特性を評価可能とするため、図8.4に示したような微細な α_W 組織とは対照的な、 γ 粒を横断するように形成した粗大な α_W の形成過程を再現した。その α_W の形成過程を図8.5に示す。ここで、異方性強度は $\xi = 0.35$ 、各 α 相の優先成長方向 $\theta_0^1 \sim \theta_0^6$ は、それぞれ 40° 、 25° 、 40° 、 130° 、 90° および 40° である。

次節以降では、図8.3(d)、図8.4(d)、図8.5(d)に示した微視組織形態を表現するRVEを作成する。そして、フェライト+パーライト組織を構成する α 相が、 α_G 、微細な α_W または粗大な α_W の形態を呈しているFP鋼の単軸引張り変形試験を行い、 α 相形態がFP鋼の巨視的、微視的変形挙動に与える影響を検討する。

8.4 代表体積要素の作成手法

均質化法を用いて、組織形成シミュレーションで予測された微視組織を有する鉄鋼材料の力学特性評価を行うためには、その微視組織形態を表現するRVEを作成する必要がある。しかしながら、鉄鋼材料内部の微視組織は極めて複雑な形態を呈しており、このような内部微視構造を表すRVEを作成し、有限要素分割を行うことは、多くの時間を費やす作業となることが多い。さらに、本研究ではPhase-Field法による組織形成シミュレーションを行うため、前節でも示したように組織形態を画像データとして出力可能である。したがって、このような画像データを直接利用して効率的にRVEを作成可能とすることができれば、組織形成予測と力学特性評価をより容易に行うことができる。そこで、本節はHollisterらが提案するデジタルイメージを用いたRVE作成方法^(195, 196)を採用し、組織形成シミュレーションで得られる組織形態を表現するRVEを作成する。

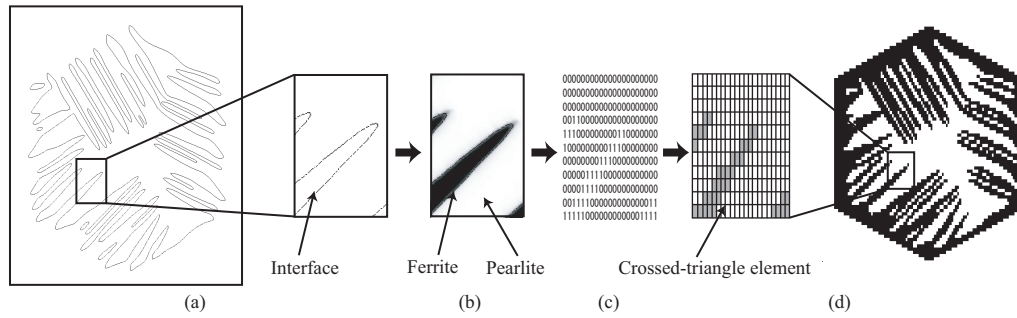


Fig.8.6 Schematic illustration of modeling procedure of representative volume element.

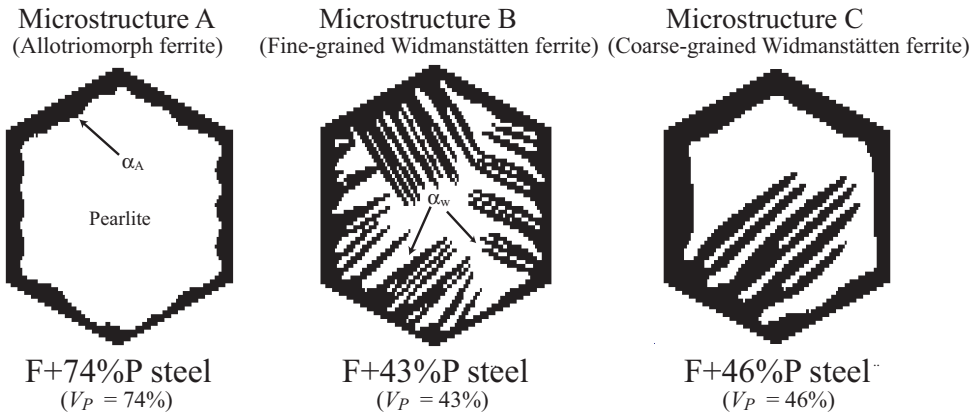


Fig.8.7 RVEs for ferrite+pearlite microstructures in F+74%P, F+43%P and F+46%P steels.

図 8.6 に、Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで得られた組織形態の画像データから、RVE を作成する概略図を示す。組織形成シミュレーションでは、phase field ϕ の分布が微視組織の分布に対応しているので、 α 相を $\phi > 0.5$ の領域、パーライト組織を $\phi < 0.5$ の領域と定義すれば、その相境界 ($\phi = 0.5$) を図 8.6 (a) のように表すことができる。そして、この相境界線に基づいて α 相を黒色、パーライト組織を白色とした、図 8.6 (b) に示すような白黒画像を作成する。次に、ここで作成した白黒画像から画像処理によって黒色の領域 (α 相) を 1、白色の領域 (パーライト組織) を 0 で表す、図 8.6 (c) に示すような ASCII イメージを作成する。さらに、この ASCII イメージの構成画素すなわち 0 と 1 の数字をそれぞれ crossed triangle 要素の一つに置換することで、RVE 内を有限要素分割するとともに、各有限要素が属する組織の情報を持たせること

ができる。最終的に、図 8.6 (d) に示すような RVE を作成することができるが、このとき白黒画像から画像変換により生成した ASCII イメージの解像度が高いほど、RVE 内の有限要素メッシュの細かくなり、より精度の高い有限要素解析が可能となる。しかしながら、それは同時に、計算時間の増加をもたらすので、本研究では 300×350 ピクセルの白黒画像から 72×100 ピクセルの ASCII イメージを作成した。なお、本解析において γ 母相粒は六角形状であると仮定したので、RVE も六角形状になるように作成した。

図 8.7 に、図 8.3 (d)、図 8.4 (d) および図 8.5 (d) で示した α 相を含むフェライト+パーライト組織 (以後、それぞれ組織 A, B, C と呼ぶ) を表現する RVE およびパーライト組織の体積分率 V_P を示す。ここで、黒色で示す領域には α 相、白色の領域にはパーライト相の物性値を与えている。また、いずれの RVE においても、5600 個の crossed triangle 要素で規則分割しており、その要素サイズは $\Delta x = 5.0 \times 10^{-2} \mu\text{m}$, $\Delta y = 8.3 \times 10^{-2} \mu\text{m}$ である。次節以降では、組織 A, B, C を含む FP 鋼をそれぞれ、F+74%P 鋼, F+43%P 鋼および F+46%P 鋼と呼ぶことにする。

8.5 フェライト-パーライト鋼の力学特性評価

本節では、前節で示したような α 相形態やパーライト組織の体積分率の異なるフェライト+パーライト組織を内部に有する FP 鋼の単軸引張り試験の数値シミュレーションを行う。そして、一連の数値シミュレーションを行うことにより、FP 鋼の巨視的な応力ひずみ曲線ならびに微視領域における組織内部の応力ひずみ分布に及ぼす、微視組織の影響を明らかにする。

8.5.1 フェライト-パーライト鋼の巨視的変形挙動に及ぼすフェライト相の影響

図 8.8 に、図 8.7 に示した各フェライト+パーライト組織を含む FP 鋼の巨視的な公称応力-公称ひずみ曲線ならびに α 単相、パーライト単一組織鋼の応力ひずみ曲線を示す。 α 相の形態が α_G である F+74%P 鋼において、最も大きな加工硬化挙動を示していることがわかる。また、硬質なパーライト組織の体積分率が最も大きいため、他の FP 鋼よりも大きな変形抵抗を示している。 α_W を含む FP 鋼においても、パーライト組織の体積分率が大きいほど、変形抵抗が増加している。以上の結果から FP 鋼の巨視的な変形挙動を支配するのは、主に硬質なパーライト組織の体積分率であり、フェライトおよ

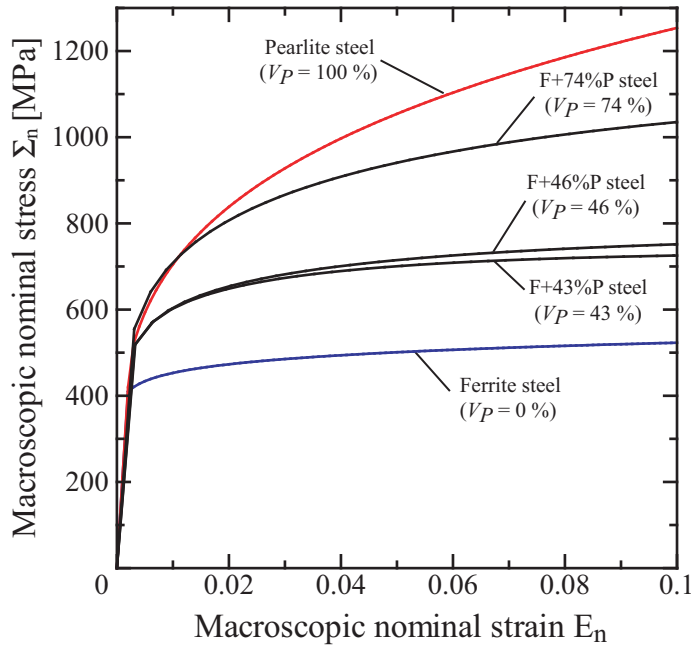


Fig.8.8 Macroscopic nominal stress - nominal strain curves for F+74%P, F+43%P and F+46%P steels.

びパーライト単一組織鋼の応力ひずみ曲線と比較すると、FP相鋼の引張り強度は、軟質相である α 相と硬質相であるパーライト組織の引張り強度の混合則によって与えられていることが示唆される。そして、この傾向は実験で得られるFP相鋼の応力ひずみ関係と定性的に一致する⁽¹⁹³⁾。

しかしながら、本解析においては、フェライト+パーライト組織内部に微細な α_w が分散されることによる、加工硬化の増加は再現できていない。これを再現するためには微視組織の特徴長さの影響を考慮可能な、ひずみ勾配結晶塑性理論^(197, 198)を用いて有限要素解析を実施することで対応できる。

8.5.2 微視組織内部の変形挙動に及ぼすフェライト相形態の影響

均質化法を用いた有限要素解析では、前節で示したようなFP鋼の巨視的な応力ひずみ曲線のみならず、組織形態に依存した組織内部の微視的な応力ひずみ分布を評価することができる。そこで本節では、 α 相の形態がFP鋼の微視的変形挙動に及ぼす影響について詳細に検討し、巨視的変形挙動との関連性を明らかにする。

F+74%P, F+43%P, F+46%P鋼の巨視的な公称ひずみ $E_n = 0.02, 0.05, 0.07, 0.1$ に

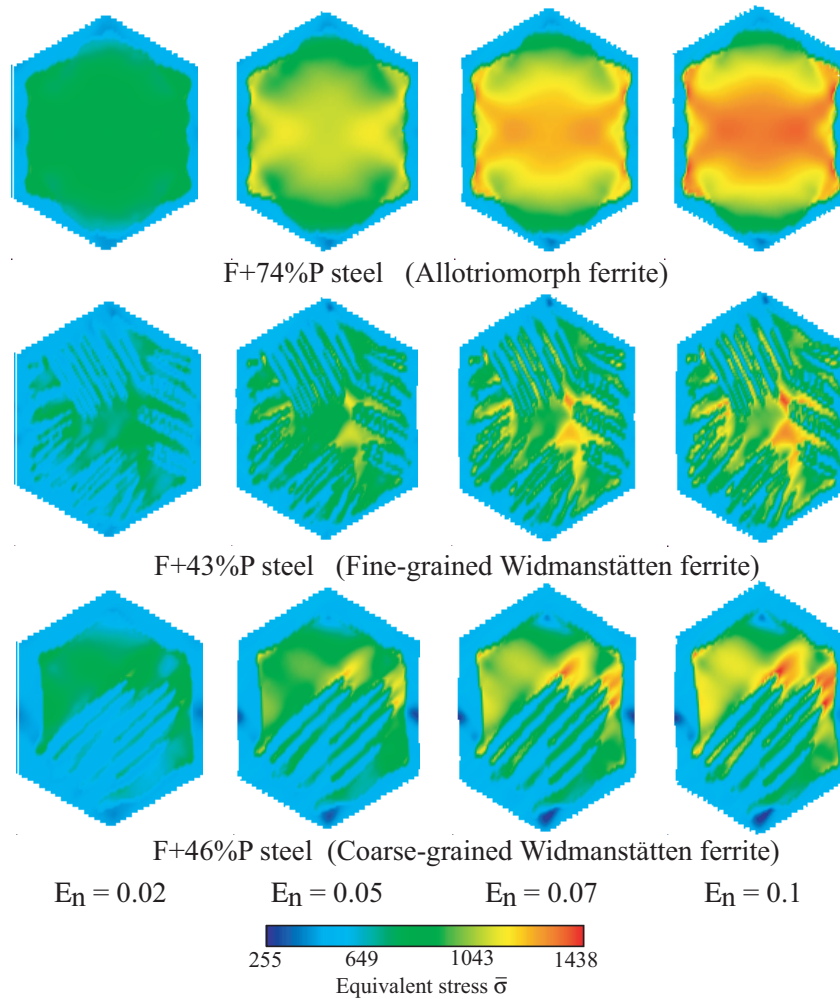


Fig.8.9 Distributions of microscopic equivalent stress $\bar{\sigma}$ in F+74%P, F+43%P and F+46%P steels.

おける、各組織内部の相当応力分布を、図 8.9 に示す。フェライト+パーライト組織を構成する α 相が α_W の形態である F+74%P 鋼および F+43%P 鋼においては、 α_W プレート間もしくはプレート先端近傍のパーライト組織で応力集中が生じているが、いずれの組織においても、硬質なパーライト組織において高い応力が生じていることが確認できる。この結果より、図 8.8 で示した各 FP 鋼の巨視的な応力-ひずみ曲線において、パーライト組織の体積分率が小さい FP 鋼ほど変形抵抗が低下したのは、 α 相の成長により、FP 鋼の変形の抵抗となる領域が減少するためであることを、微視的変形挙動の評価からも明らかにすることができる。

次に、図 8.10 に F+74%P, F+43%P, F+46%P 鋼の巨視的な公称ひずみ $E_n = 0.02$,

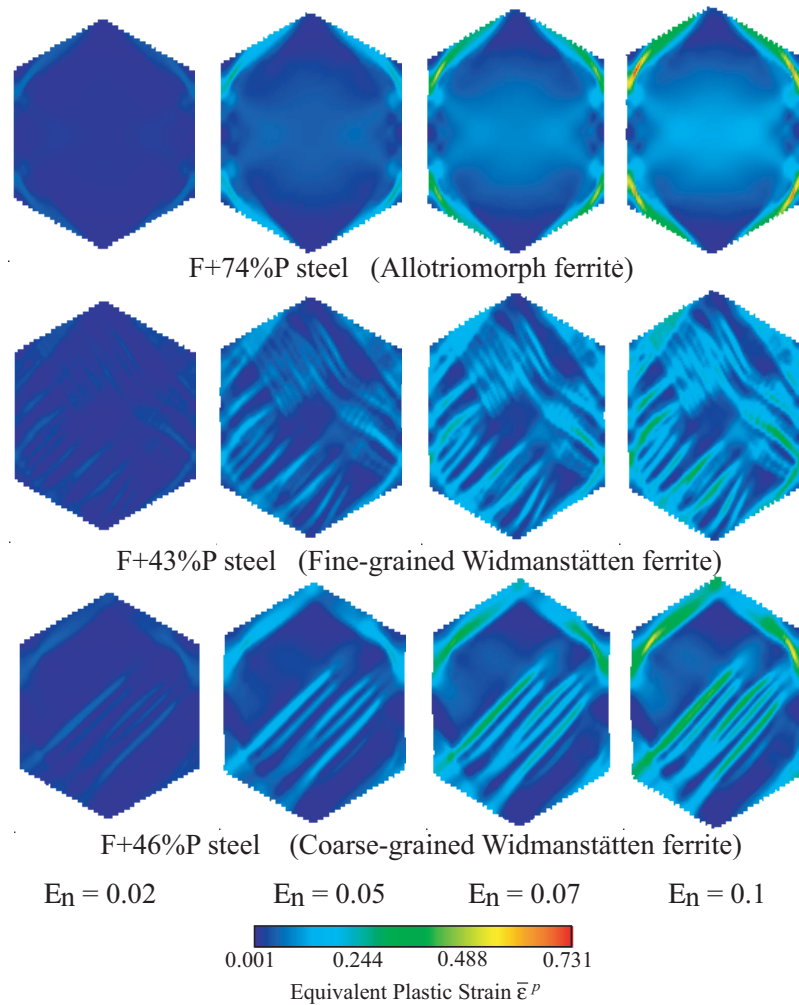


Fig.8.10 Distributions of microscopic equivalent plastic strain $\bar{\epsilon}^p$ in F+74%P, F+43%P and F+46%P steels.

0.05, 0.07 および 0.1 における, 組織内部の相当塑性ひずみ分布を示す. α_G を含む F+74%P 鋼では, 図 8.8 に示したように巨視的には大きな変形抵抗を示すが, 組織内部では巨視的なひずみの増加に伴って, 旧 γ 粒界近傍の α_G で著しい塑性ひずみの集中が発生することが分かる.

これに対して, 旧 γ 粒内に微細な α_W が分散した FP 鋼においては, 粒内の α_W プレートにおいてほぼ均一に塑性変形が生じており, F+74%P 鋼でみられたような旧 γ 粒界近傍での塑性ひずみの集中が軽減されていることがわかる. しかしながら, F+46%P 鋼のように α 相が α_W の形態を呈していても, γ 粒内に粗大な α_W が形成すると, 負荷方向に対して 45 度の角度をなす α_W や α_G において, 塑性変形が集中することが分かる.

以上の結果より、FP 鋼のような軟質な α 相とパーライト、ベイナイト、マルテンサイト相などの硬質相の 2 相組織を有する Dual-Phase 鋼において、塑性ひずみの集中を抑制し、材料の力学的特性を改善するためには、 α 相が α_G の形態を呈する場合には、 α_G を強化すること、もしくは FP 鋼内部に微細な α 相を分散させることが有効な組織制御方法であることがわかる。このように、本章で構築した材質予測シミュレーションを繰り返し実施することで、要求される特性を有する鉄鋼材料を創製するための微視組織形態およびその組織制御方法の指針を得ることができる。

8.6 結言

本章では、Phase-Field 法と均質化法に基づく弾塑性有限要素法を用いて、鉄鋼材料における組織形成予測と組織形態に基づいた力学特性評価を系統的に実施可能な材質予測手法を構築した。そして、本手法を用いて、FP 鋼の材質予測シミュレーションを行い、その有効性を検証した。

はじめに、Phase-Field 法による組織形成シミュレーションにより、 γ 粒内の α 相形成過程を再現し、FP 鋼内部の微視組織の形成を予測した。ついで、そこで得られる微視組織の画像データを直接利用することにより、 α 相形態の異なるフェライト+パーライト組織を表現する RVE を作成とした。さらに、その RVE を用いて均質化法に基づく弾塑性有限要素解析を実施し、FP 鋼の巨視的および微視的な変形挙動に及ぼすフェライト+パーライト組織の影響を明らかにした。以下に、本章で得られた結果をまとめる。

FP 鋼の巨視的な応力-ひずみ曲線に及ぼす微視組織の影響を明らかにするため、 α 相形態およびパーライト組織の体積分率の異なる FP 鋼の単軸引張り試験の数値シミュレーションを行った。その結果、パーライト組織の体積分率が大きいほど、FP 鋼の変形抵抗が増大することがわかった。すなわち、FP 鋼の巨視的な変形挙動を支配するのは、主に硬質なパーライト組織の体積分率であり、FP 相鋼の引張り強度は、軟質相と硬質相の引張り強度の混合則によって与えられると考えてよいことを確認した。

つづいて、FP 鋼内部の組織形態に依存した微視的な応力・ひずみ分布を評価することで、 α 相形態と FP 鋼の巨視的な変形挙動の関係を明らかにすることを試みた。まず、組織内部の相当応力分布を評価した結果、硬質なパーライト組織が FP 鋼の変形に対する抵抗となっているため、パーライト組織の体積分率が減少するほど、巨視的な変形抵抗が減少することを明らかにした。さらに、組織内部の相当塑性ひずみ分布を評価したと

ころ, α_G を含む FP 鋼では巨視的なひずみの増加に伴って, 旧 γ 粒界近傍の α 相で著しく塑性ひずみが集中することが分かった. 一方, 組織内に微細な α_W が分散した FP 鋼においては, α_W プレートにおいてほぼ一様に塑性変形が生じ, 旧 γ 粒界近傍における塑性ひずみの集中が軽減されることが明らかになった.

したがって, 本章で実施した FP 鋼の材質予測シミュレーションにより, FP 鋼の力学的特性を改善するためには, 次のような組織制御の指針を得ることができる. すなわち, FP 鋼内部の α 相が α_G の形態を呈する場合には, α_G を強化すること, もしくは組織内に微細な α 相を形成させることで, 高ひずみ領域の形成を抑制することができる.

一般に, 材料の微視組織形態に依存して変化する微視的な応力やひずみの分布ならばにそれらが巨視的力学応答に及ぼす影響を, 実験的手法のみで明らかにし, 微視組織の最適化を行うことは容易ではない. したがって, 本章で提案した材質予測手法を用いることによって, 所望の機械的特性を発現させる微視組織形態を, 系統的に評価することが可能となる. これは今後, 数値シミュレーションによって材料組織制御を行い, 効率的な材料設計を行ううえで非常に有効な手段になりうると期待される.

第9章

結論

産業技術の発展に伴い、これまで以上に高品質、高機能な鉄鋼材料の開発が求められており、様々な合金元素の添加や複雑な製造プロセスを経て、用途に合わせた多種多様な鉄鋼材料が開発されている。しかし、その一方で、従来の知識や経験のみでは理解することが困難な、複雑な相変態挙動や微視組織形成が生じるようになり、力学特性の予測を困難にしているのも事実である。そのため現在では、従来の実験的手法に加えて、数値シミュレーションを援用した材質予測技術の確立が強く求められている。

本研究では、このような数値シミュレーションによる鉄鋼材料の材質予測を実施可能とするために、Phase-Field 法による鉄鋼材料における変態組織の形成予測および均質化法に基づく弾塑性有限要素法を用いた力学特性評価を体系的に実施可能な、系統的材質予測シミュレーション法を構築した。ついで、この材質予測シミュレーション法を用いて、鉄鋼材料の内部組織を構成するフェライト、パーライト、マルテンサイトの各単一組織の形成シミュレーションを行うとともに、組織形成予測と鉄鋼材料の力学特性評価を一貫して行い、構築した材質予測手法の有効性や可能性を検討した。以下では、本研究で得られた結果を章ごとにまとめて示す。

第2章では、はじめに Phase-Field 法の基本概念を述べ、Phase-Field 法が Cahn-Hilliard モデルおよび Allen-Cahn モデルと形式的に等価であり、本手法を用いることで全自由エネルギーに基づいて、材料の種類に依存せず同じ枠組みで、組織形成過程のモデル化が可能であることを示した。ついで、フェライト変態、パーライト変態などの拡散変態の Phase-Field モデルを導出し、塑性緩和が生じるマルテンサイト変態を表現可能な Phase-Field モデルを新たに構築した。さらに、鉄鋼材料の力学特性評価を行うために用いる 2 変数漸近展開理論に基づく均質化法について述べ、有限要素方程式を導出した。

第3章では、鉄鋼材料の微視組織の最も基本的な構成相である α 相の形成予測を行

うために、副格子モデルに基づく拡散変態の Phase-Field モデルを用いて、Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを行い、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態とそれに伴う炭素拡散挙動の温度、初期炭素濃度依存性について詳細に検討した。その結果、温度が低下するほど界面の易動度と γ 相での炭素原子の易動度が減少し、 α/γ 界面近傍の γ 相における炭素原子の偏析量が増加するため、 α 相の成長が抑制されることを確認した。さらに、 $\alpha/\alpha + \gamma$ 境界付近の初期炭素濃度ではマッシュ変態が生じることを示し、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態は拡散律速変態と界面律速変態の両方の性質を有しており、温度と濃度に依存して変態機構が変化することを明らかにした。ついで、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態による Widmanstätten フェライトの形成シミュレーションを行い、Widmanstätten フェライトの形成機構やその形態に及ぼす界面異方性の影響を検討した。その結果、Widmanstätten フェライトが形成するためには、強い界面異方性が必要であり、本研究では、修正勾配エネルギー係数を用いることで、鋭いプレート先端形状を再現可能であることを示した。また、強い界面異方性によって初期 α 相に形成されたチップ先端が融合を繰り返しながら成長し、形態不安定性により選択的に Widmanstätten フェライトプレートへと成長することを明らかにした。

第4章では、副格子モデルに基づく Phase-Field 法では正確に表現することの困難な、多結晶 γ 相における α 相形成を予測するために、Multi-Phase-Field 法を用いて、Fe-C-Mn 合金の連続冷却過程における α 粒成長シミュレーションを実施した。そして、冷却速度が $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に及ぼす影響を検討したところ、冷却速度が増加するほど化学的駆動力を増加させるため、 α 粒の成長を促進するが、温度の低下とともに炭素原子の拡散係数および界面モビリティは減少する。したがって、 α/γ 界面の移動速度が減少し、 α/γ 界面近傍において炭素原子が大きく偏析することで、 α 粒の成長を抑制することがわかった。さらに、相および方位差に依存した界面エネルギーや界面モビリティが α 粒の成長挙動や組織形態に与える影響を検討した。その結果、 γ 相と KS 関係を満たす α 相の成長挙動と類似した、 γ 粒界に沿って α 相が成長する挙動や隣あう一方の γ 相にのみ成長する過程などが再現された。この結果から、より現実的な α 粒の成長過程を再現するためには、界面エネルギーや界面モビリティの相・方位差依存性を考慮する必要があることを示唆した。

第5章では、鉄鋼材料の冷却工程において α 変態後に生じるパーライト組織形成を予測するために、Multi-Phase-Field 法を用いて Fe-C-Mn 合金におけるパーライト組織の形成シミュレーションを行った。ここでは、まずラメラ間隔に依存したパーライト

組織の成長速度を評価し、ラメラ間隔が小さくなるほどラメラの成長が速くなるという、実験や Zener-Hillert モデルで報告されている結果と同様の傾向が得られた。また、粒界拡散を Phase-Field モデルに導入し、組織形態や成長速度に及ぼす影響を検討した。その結果、粒界拡散を導入することにより、 α 相と θ の協調的な成長が助長され、パーライト組織の成長速度が増加することがわかった。これにより従来の解析結果よりも、実験で得られる成長速度に近い値が予測された。さらに、 γ 相内の炭素濃度の不均一性に依存して、 α 相と γ 相の成長挙動が変化することで、実験で観察されるようなラメラの曲がりや θ 相の途切れが形成されることを明らかにした。

第 6 章では、鉄鋼材料の構成相のなかでも、強化相として重要なマルテンサイト組織の形成予測を可能とするため、変態ひずみの自己緩和 (SA) および塑性緩和 (PA) を生じるマルテンサイト変態を表現する Phase-Field モデルを構築した。そして、それを用いて単結晶および多結晶母相におけるマルテンサイト組織の形成シミュレーションを行い、PA および SA によるひずみ緩和が組織形成過程に及ぼす影響を明らかにした。その結果、変態ひずみを緩和するためにマルテンサイト相および母相において塑性変形が生じるとともに、塑性変形した母相で自己緩和バリエーションが形成することで、実験で観察されるようなマルテンサイト組織内部の結晶欠陥が導入されることが示唆された。また、多結晶母相におけるマルテンサイト変態では、母相粒間の弾性相互作用によって粒界三重点で応力集中が生じ、そこから優先的にマルテンサイト相が形成する様子が再現された。また、マルテンサイト相の組織形態は弾性ひずみエネルギーを最小化するように生じる、PA と SA のバランスに依存して特徴づけられていることを示した。

第 7 章では、鉄鋼材料におけるベイナイト変態に見られるような拡散変態と無拡散変態の競合反応による組織形成過程を表現する統一的 Phase-Field モデルを提案した。そして、2 元合金の等温保持において、立方晶 (母相) のスピノーダル分解とマルテンサイト変態による新相形成が同時に生じる競合変態の数値シミュレーションを行い、溶質原子の初期濃度に依存した競合変態挙動や組織形成過程を詳細に検討した。その結果、本 Phase-Field モデルを用いることにより、初期炭素濃度や組織形成過程における溶質拡散による濃度変化に依存した複雑な相変態挙動を、エネルギー論、速度論的な観点から系統的に評価することができた。本章では、モデル合金を解析対象として数値シミュレーションを実施したが、鉄鋼材料にも適用可能であり、今後ベイナイト変態における組織形成過程を明らかにする有益な情報が得られるものと期待される。

第 8 章では、以上で示したような Phase-Field 法による組織形成シミュレーションで

予測される組織形態に基づき、鉄鋼材料の力学特性の評価を行い、一連の材質予測シミュレーション手法を提案した。ここでは、第3章で示した Fe-C 合金における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の数値シミュレーションを用いて α 組織形態の予測およびその α 組織を内部組織とするフェライト-パーライト (FP) 鋼の力学特性評価を行った。その結果、FP 鋼の巨視的な変形挙動を支配するのは、主に硬質なパーライト組織の体積分率であり、FP 相鋼の引張り強度は、軟質相と硬質相の引張り強度の混合則によって与えられると考えてよいことを確認した。さらに、FP 鋼内部の組織形態に依存した微視的な応力・ひずみ分布を評価した結果、 α 相の形態が α_G の場合には、旧 γ 粒界近傍に塑性変形が集中するが、粒内に微細な α_W が形成された FP 鋼では、 α_W で塑性変形がほぼ均一に生じ、塑性変形の集中が抑制されることがわかった。したがって、FP 鋼の力学的特性を改善するためには、FP 鋼内部の α 相が α_G の形態を呈する場合には、固溶強化等により α_G を強化すること、もしくは組織内に微細な α 相を形成させることで、高ひずみ領域の形成を抑制することが有効であるという指針を得ることができた。

以上のように、本論文では Phase-Field 法と均質化法を用いて、フェライト、パーライト、マルテンサイトなどの代表的な相変態組織の形成予測と力学特性評価を可能とする材質予測シミュレーション法を構築した。そして、それを用いた一連のシミュレーションを行うことにより、各種相変態によりもたらされる各組織の形成メカニズムや材料の最終的な力学特性を支配する組織因子を明らかにすることができた。今後、提案した材質予測手法を結晶方位の影響を考慮可能な形式に発展させることによって、多結晶材料の個々の結晶粒レベルの組織形成過程の予測や力学特性の評価が可能となると考えられる。さらに、本研究で提案した材質予測手法は、広範な適用性を有しており、実際の鉄鋼材料の製造プロセスにおける、全ての組織形成過程の予測および複相組織鋼の力学特性評価を一貫して実施可能である。したがって、このような材質予測シミュレーションを計算機実験とみなして繰り返し実施することにより、要求される力学特性を発現させるための組織制御方法や革新的な鉄鋼材料の開発に有効な材料設計指針を示すことができると期待される。

参考文献

- (1) 谷野満, 鈴木茂, 鉄鋼材料の科学, 内田老鶴圃, (2001), pp. 62-66.
- (2) 牧正志, 鉄鋼材料の魅力 - そのミクロの世界 -, 熱処理, (2004), 第44巻, 4号, pp. 224-231.
- (3) 井上達雄, 日本刀-その材料, 鍛錬および焼入れのシミュレーション, まてりあ, (1996), 第35巻, 2号, pp. 174-178
- (4) 上原拓也, 井上達雄, 日本刀の焼入れにおける焼刀土の効果, 材料, (1995), 第44巻, 498号, pp. 309-315.
- (5) 榎本正人, 鉄鋼材料の相変態と析出のシミュレーション, 第180, 181回西山記念技術講座, 日本鉄鋼協会, (2004), pp. 25-46.
- (6) 瀬沼武秀, 鉄鋼材料の組織材質予測制御技術の現状と展望, 第180, 181回西山記念技術講座, 日本鉄鋼協会, (2004), pp. 99-125.
- (7) 斎藤良行, 宮川昌治, 鈴木健一郎, 上田修三, 志賀千晃, 連铸-圧延プロセスにおけるマイクロアロイ鋼の組織と材質予測, 鉄と鋼, (1988), 第74巻, 7号, pp. 1462-1469
- (8) 吉野雅彦, 白石知宏, 白樫高洋, 金属材料の材質予測のための内部変数, 日本機械学会論文集 A 編, (1998), 第64巻, 624号, pp. 2039-2045.
- (9) 日本鉄鋼協会, 材料の組織と特性部会・創形創質工学部会 材料プロセス共通課題検討 WG シンポジウム資料, 鉄鋼材料の製造段階から製品に至るまでのナノ・ミクロ・メゾ・マクロスケール組織に基づいた材質予測技術の現状と課題- 最終目標としての一貫材質予測プログラムの構築にむけて -, (2004).
- (10) 柳本潤, 変形加工プロセスシミュレーションを核とした内部組織予測技術, 日本機械学会誌, (2005), 第108巻, 1043号, pp. 778-780.
- (11) 梅本実, 鉄鋼材料の組織から機械的性質を予測する手法の現状と課題, 鉄と鋼, (1995), 第81巻, 3号, pp. 157-166.

- (12) 榎本正人, 金属の相変態, 内田老鶴圃, (2001), pp. 6-8.
- (13) H. K. D. H. Bhadeshia, Bainite in Steels, Second Edition, The Institute of Materials, London, (2001).
- (14) 榎本正人, 拡散変態として見たベイナイト変態, 日本金属学会誌, (1989), 第28巻, 9号, pp. 732-741.
- (15) 大森靖也, せん断型変態として捉えたベイナイト変態, 日本金属学会誌, (1990), 第29巻, 7号, pp. 542-551.
- (16) D. Raabe, Computational Materials Science, Wiley-VCH, (1998), pp. 47-244.
- (17) 斎藤良行, 組織形成と拡散方程式, コロナ社, (2000).
- (18) M. P. Anderson, D. J. Srolovitz, G. S. Grest and P. S. Sahni, Computer Simulation of Grain Growth -I. Kinetics, Acta Metallurgica, (1984), Vol. 32, pp. 783-791
- (19) Y. Saito, Monte Carlo Simulation of Grain Boundary Precipitation, Materials Science and Engineering A, (1997), Vol. 223, pp. 125-133.
- (20) D. Raabe, Scaling Monte Carlo Kinetics of the Potts Model using Rate Theory, Acta Materialia, (2000), Vol. 48, pp.1617-1628.
- (21) S. Wolfram, Undecidability and Intractability in Theoretical Physics, Physical Review Letters, (1985), Vol. 54, pp. 735 - 738
- (22) M. Kumar, R. Sasikumar and P. K. Nair , Competition Between Nucleation and Early Growth of Ferrite from Austenite -Studies using Cellular Automaton Simulations-, Acta Materialia, (1998), Vol. 46, pp. 6291-6303.
- (23) L. Zhang, C. B. Zhang, Y. M. Wang, S. Q. Wang and H. Q. Ye, A Cellular Automaton Investigation of the Transformation from Austenite to Ferrite during Continuous Cooling, Acta Materialia, (2003), Vol. 51, pp. 5519-5527
- (24) M. Tong, D. Li and Y. Li, Modeling the Austenite-ferrite Diffusive Transformation during Continuous Cooling on a Mesoscale using Monte Carlo Method, Acta Materialia, (2004), Vol. 52, pp. 1155-1162.

- (25) N. Xiao, M. Tong, Y. Lan, D. Li and Y. Li, Coupled Simulation of the Influence of Austenite Deformation on the Subsequent Isothermal Austenite-ferrite Transformation, *Acta Materialia*, (2006), Vol. 54, pp. 1265-1278.
- (26) Y. J. Lan, D. Z. Li and Y. Y. Li, Modeling Austenite Decomposition into Ferrite at Different Cooling Rate in Low-carbon Steel with Cellular Automaton Method, *Acta Materialia*, (2004), Vol. 52, pp. 1712-1729.
- (27) Y. J. Lan, N. M. Xiao, D. Z. Li and Y. Y. Li, Mesoscale Simulation of Deformed Austenite Decomposition into Ferrite by Coupling a Cellular Automaton Method with a Crystal Plasticity Finite Element Model, *Acta Materialia*, (2005), pp. 991-1003.
- (28) G. Caginalp, An Analysis of a Phase-Field Model of a Free Boundary, *Achieve for Rational Mechanics and Analysis*, (1986), Vol. 92, pp. 205-245.
- (29) R. Kobayashi, Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth, *Physica D*, (1993), Vol. 63, pp. 410-423.
- (30) L. Q. Chen, Introduction to the Phase-Field Method of Microstructure Evolution, *Continuum Scale Simulations of Engineering Materials*, edited by D. Raabe, F. Roters, F. Barlat, L. Q. Chen, Wiley-VCH, (2004), pp. 37-51.
- (31) L. Q. Chen, Phase-Field Models for a Microstructure Evolution, *Annual Review of Materials Research*, (2002), Vol. 32, pp. 113-140.
- (32) W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann and A. Karma, Phase-Field Simulation of Solidification, *Annual Review of Materials Research*, (2002), Vol. 32, pp. 163-194.
- (33) 高木知弘, フェーズフィールド法による相変化解析, 計算力学ハンドブック, 矢川元基, 宮崎則幸編, 朝倉書店, (2007), pp. 376-389.
- (34) 小山敏幸, Phase-field 法に基づく組織形成過程の計算機シミュレーション, 第 180, 181 回西山記念技術講座, 日本鉄鋼協会, (2004), pp. 49-71.

- (35) A. A. Wheeler, W. J. Boettinger and G. B. McFadden, Phase-field Model for Isothermal Phase Transitions in Binary Alloys, *Physical Review E*, (1992), Vol. 45, pp. 7424-7439.
- (36) S. G. Kim, W. T. Kim, J. S. Lee, M. Ode and T. Suzuki, Large Scale Simulation of Dendritic Growth of Pure Undercooling Melt by Phase-Field Model, *ISIJ International*, (1999), Vol. 39, pp. 335-340.
- (37) A. Karma and W. J. Rappel, Phase-field Model of Dendritic Sidebranching with Thermal Noise, *Physical Review E*, (1999), Vol. 60, pp. 3614-3625.
- (38) M. Ode, S. G. Kim and T. Suzuki, Recent Advances in the Phase-field Model for Solidification, *ISIJ International*, (2001), Vol. 41, pp. 1076-1082.
- (39) M. Ode and T. Suzuki, Numerical Simulation of Initial Microstructure Evolution of Fe-C Alloys Using a Phase-field Model, *ISIJ International*, (2002), Vol. 42, pp. 368-374.
- (40) 高木知弘, 福岡俊道, 富田佳宏, 二元合金の一方向凝固過程における界面異方性形態のフェーズフィールドシミュレーション, *日本機械学会論文集 A 編*, (2004), 第 70 巻, 691 号, pp. 456-463.
- (41) L. Granasy, T. Pusztai, G. Tegze, J. A. Warren and J. F. Douglas, Growth and Form of Spherulites, *Physical Review E*, (2005), Vol. 72, pp. 011605.
- (42) T. Takaki, T. Fukuoka, Y. Tomita, Phase-Field Simulation During Directional Solidification of A Binary Alloy Using Adaptive Finite Element Method, *Journal of Crystal Growth*, (2005), Vol.283, pp. 263-278.
- (43) Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, Phase Field Simulation of Stored Energy Driven Interface Migration at a Recrystallization Front, *Materials Science and Engineering A*, (2007), Vol. 457, pp. 132-138.
- (44) 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, 静的な一次再結晶過程の Phase-field モデルと解析手順の構築, *日本機械学会論文集 A 編*, (2007), 第 73 巻, 728 号, pp. 482-489.

- (45) S. Sreekala and M. Haataja, Recrystallization Kinetics: A Coupled Coarse-grained Dislocation Density and Phase-field Approach, *Physical Review B*, (2007), Vol. 76, pp. 094109.
- (46) S. Y. Hu and L. Q. Chen, A Phase-Field Model for Evolving Microstructures with Strong Elastic Inhomogeneity, *Acta Materialia*, (2001), Vol.49, pp. 1879-1890
- (47) T.Koyama and T.Miyazaki, Computer Simulation of Phase Decomposition in Two Dimensions Based on a Discrete Type Non-linear Diffusion Equation, *Materials Transactions*, (1998), Vol.39, pp. 169-178.
- (48) A. Onuki, Pretransitional Effects at Structural Phase Transitions, *Journal of the Physical Society of Japan*, (1999), Vol. 68, pp. 5-8.
- (49) D. Fan and L. Q. Chen, Computer Simulation of Twin Formation during the Displacive $c \rightarrow t$ Phase Transformation in the Zirconia-Yttria System, *Journal of American Ceramics Society*, (1995), Vol. 78, pp. 769-773.
- (50) Y. M. Jin, Y. U. Wang and A. G. Khachaturyan, Three-dimensional Phase Field Microelasticity Theory and Modeling of Multiple Cracks and Voids, *Applied Physics Letters*, (2001), Vol. 79, pp. 3071-3073.
- (51) Y. U. Wang, Y. M. Jin and A. G. Khachaturyan, Three-dimensional Phase Field Microelasticity Theory of Complex Elastically Inhomogeneous Solids, *Applied Physics Letters*, (2002), Vol. 80, pp. 4513-4515.
- (52) A. Minami and A. Onuki, Nonlinear Elasticity Theory of Dislocation Formation and Composition Change in Binary Alloys in Three Dimensions, *Acta Materialia*, (2007), Vol. 55, pp. 2375-2384.
- (53) W.A. Johnson and R.F. Mehl, Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth, *Transactions of the AIME*, (1939), Vol.135, pp. 416-458
- (54) 井上達雄, 田中喜久昭, 長岐滋, 固体力学と相変態の解析, 大河出版, (1995).

- (55) J. D. Eshelby, The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, Proceedings of Royal Society London, (1957), Vol. A241, pp. 376-396.
- (56) 村外志夫, 森勉, マイクロメカニクス 転位と介在物, 培風館, (1976).
- (57) Y. Tomota, K. Kuroki, T. Mori and I. Tamura, Tensile Deformation of Two-ductile-phase Alloys: Flow Curves of - Fe-Cr-Ni Alloys, Materials Science and Engineering, (1976), Vol. 25, pp. 85-94.
- (58) T. Mori and K. Tanaka, Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions, Acta Metallurgica, (1973), Vol. 21, pp. 71-74.
- (59) G. J. Weng, The Overall Elastoplastic Stress-strain Relations of Dual-phase Metals, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, (1990), Vol. 38, pp. 419-441.
- (60) 小谷清二, 土田紀之, 友田陽, 複合組織鋼の変形応力の secant 法を用いた上下界予測と関連ミクロ組織, 鉄と鋼, (1997), Vol. 83, pp. 55-60.
- (61) Rudiono and Y. Tomota, Application of the Secant Method to Prediction of Flow Curves in Multi-microstructure Steels, Acta Materialia, (1997), Vol. 45, pp. 1923-1929.
- (62) J. M. Guedes and N. Kikuchi, Preprocessing and Postprocessing for Materials based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods, Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering, (1990), Vol. 83, pp. 143-198.
- (63) 寺田賢二郎, 菊池昇, 均質化法入門, 丸善, (2003).
- (64) 高野直樹, 座古勝, 微視破壊を考慮した均質化法による織物複合材料の非線形解析, 材料, (1995), 第44巻, 505号, pp. 1231-1237.
- (65) 高野直樹, 座古勝, 平郡久司, 菊池昇, 複合材料のマイクロ構造における幾何学的非線形性と破壊を考慮した均質化解析手法, 日本機械学会論文集 A 編, (1996), 第62巻, 595号, pp. 859-864.

- (66) S. Jansson, Homogenized Nonlinear Constitutive Properties and Local Stress Concentrations for Composites with Periodic Internal Structure, *International Journal of Solids and Structures*, (1989), Vol. 29, pp. 2181-2200.
- (67) 寺田賢二郎, 弓削康平, 菊池昇, 均質化法を用いた複合材料の弾塑性解析 (第1報, 定式化), *日本機械学会論文集 A 編*, (1995), 第 61 巻, 590 号, pp. 2199-2205.
- (68) 寺田賢二郎, 弓削康平, 菊池昇, 均質化法を用いた複合材料の弾塑性解析 (第2報, 数値解析), *日本機械学会論文集 A 編*, (1996), 第 62 巻, 601 号, pp. 2072-2079.
- (69) 渋谷嗣, S. S. Wang, 界面に損傷を有する金属基繊維複合材料の非線形挙動の解析, *日本機械学会論文集 A 編*, (1995), 第 61 巻, 584 号, pp. 736-742.
- (70) 岡田裕, 福井泰好, 熊澤典良, 丸山拓也, 大変形弾塑性材料の均質化法による解析 (第1報, 周期性の仮定を厳密に満足するための定式化), (1998), *日本機械学会論文集 A 編*, 第 64 巻, 618 号, pp. 450-456.
- (71) 呉旭, 大野信忠, 周期的内部構造を有する複合材料の時間依存変形に対する均質化理論, *日本機械学会論文集 A 編*, (1997), 第 63 巻, 613 号, pp. 1971-1978.
- (72) 比嘉吉一, 富田佳宏, 粒子強化型複合材の均質化法による変形挙動のモデル化とシミュレーション, *日本機械学会論文集 A 編*, (2000), 第 66 巻, 648 号, pp. 1441-1446.
- (73) 松井和己, 寺田賢二郎, 秋山雅義, 久保木孝, 及川兼司, マルチスケールモデリングによる Bauschinger 効果の発現メカニズムの解明, (2002), 第 68 巻, 675 号, pp. 1559-1566.
- (74) K. Terada, K. Matsui, M. Akiyama and T. Kuboki, Numerical Re-examination of the Micro-scale Mechanism of the Bauschinger Effect in Carbon Steels, *Computational Materials Science*, (2004), Vol.31, pp.67-83
- (75) G. P. Krielaart, J. Sietma and S. van der Zwaag, Ferrite Formation in Fe-C Alloys during Austenite Decomposition under Non-equilibrium Interface Conditions, *Materials Science and Engineering A*, (1997), Vol. A237, pp. 216-223.

- (76) E. Gamsjager, J. Svoboda and F. D. Fischer, Austenite-to-Ferrite Phase Transformation in Low-alloyed Steels, *Computational Materials Science*, (2005), Vol. 32, pp. 360-369.
- (77) M. Hillert, Solute Drag, Solute Trapping and Diffusional Dissipation of Gibbs Energy, *Acta Materialia*, (1999), Vol. 47, pp. 4481-4505.
- (78) M. Enomoto, Influence of Solute Drag on the Growth of Proeutectoid Ferrite in Fe-C-Mn Alloy, *Acta Materialia*, (1999), Vol. 47, pp. 3533-3540.
- (79) H. Emmerich, The Diffuse Interface Approach in Materials Science, *Thermodynamics Concepts and Applications of Phase-Field Models*, Springer-Verlag, Gerlin, (2003).
- (80) J. S. Rowlinson, Translation of J. D. van der Waals, The Thermodynamik Theory of Capillarity under the Hypothesis of a Continuous Variation of Density, *Journal of Statistical Physics*, (1979), Vol. 20, pp. 197-200.
- (81) L. Onsager, Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I., *Physical Review*, (1931), Vol. 37, pp. 405-426.
- (82) J. W. Cahn and J. E. Hilliard, Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *Journal of Chemical Physics*, (1958), Vol. 28, pp. 258-267.
- (83) J. W. Cahn, On Spinodal Decomposition, *Acta Metallurgica*, (1961), Vol. 9, pp. 795-801.
- (84) J. W. Cahn, On Spinodal Decomposition in Cubic Crystals, *Acta Metallurgica*, (1962), Vol. 10, pp. 179-183.
- (85) S. M. Allen and J. W. Cahn, A Microscopic Theory for Antiphase Boundary Motion and its Application to Antiphase Domain Coarsening, *Acta Metallurgica*, (1979), Vol.27, pp.1085-1095.
- (86) N. Saunders and A. P. Miodownik, *CALPHAD*, Pergamon, (1998).
- (87) 小山敏幸, 相変態シミュレーションを利用した自己組織形成の解析, *まてりあ*, (2003), Vol. 42, pp. 470-474.

- (88) A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformation in Solids*, John and Sons, New York, (1983).
- (89) I. Loginova, J. Ågren and G. Amberg, The Phase-field Approach and Solute Drag Modeling of the Transition to Massive $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in Binary Fe-C Alloys, *Acta Materialia*, (2003), Vol. 51, pp.1327-1339.
- (90) 高木知弘, 富田佳宏, 自己組織化量子ドットの形態発展と bimodal サイズ分布の Phase-field シミュレーション, (2004), *材料*, 第 70 巻, 699 号, pp.1551-1558.
- (91) M. Hillert and L. I. Staffson, An Analysis of the Phase Equilibria in the Fe-FeS System, *Metallurgical Transactions B*, (1975), Vol.6B, pp.37-41.
- (92) M. Hillert, Diffusion and Interface Control of Reactions in Alloys, *Metallurgical Transactions A*, (1975), Vol.6A, pp.5-19.
- (93) J-O. Andersson and J. Ågren, Models for Numerical Treatment of Multicomponent Diffusion in Simple Phases, *Journal of Applied Physics*, (1992), Vol.72, pp.1350-1355.
- (94) J. Ågren, A Revised Expression for the Diffusivity of Carbon in Binary Fe-C Austenite, *Scripta Metallurgica*, (1986), Vol. 20, pp.1507-1510.
- (95) J. Ågren, Computer Simulations of the Austenite/Ferrite Diffusional Transformations in Low Alloyed Steels, *Acta Metallurgica*, (1982), Vol.30, pp.841-851.
- (96) 後藤芳彦, 結晶成長, 内田老鶴圃, (2003), p.55.
- (97) J. J. Eggleston, G. B. McFadden and P. W. Voorhees, A Phase-field Model for Highly Anisotropic Interfacial Energy, *Physica D*, (2001), Vol.150, pp.91-103.
- (98) L. -Q. Chen and W. Yang, Computer Simulation of the Domain Dynamics of a Quenched System with a Large Number of Nonconserved Order Parameters: The grain-growth kinetics, *Physical Review B*, (1994), Vol.50, pp.15752.
- (99) I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßberg, R. Pieler, G. J. Schmitz and J. L. L. Rezende, A Phase Field Concept for Multiphase Systems, *Physica D*, (1996), Vol. 94, pp.135-147.

- (100) J. Eiken, B. Bottger and I. Steinbach, Multiphase-field Approach for Multicomponent Alloys with Extrapolation Scheme for Numerical Application, *Physical Review E*, (2006), Vol. 73, pp.066122.
- (101) I. Steinbach and F. Pezzolla, A Generalized Field Method for Multiphase Transformations Using Interface Fields, *Physica D*, (1999), Vol. 134, pp. 385-393.
- (102) J. Tiaden, B. Nestler, H. J. Diepers and I. Steinbach, The Multiphase-field Model with an Integrated Concept for Modelling Solute Diffusion, *Physica D*, (1998), Vol.115, pp.73-86.
- (103) M. Militzer, M. G. Meozzi, J. Sietsma and S. van der Zwaag, Three-Dimensional Phase Field Modelling of the Austenite-to-Ferrite Transformation, *Acta Materialia*, (2006), Vol. 54, pp.3961-3972.
- (104) M. G. Meozzi, J. Sietsma, S. van der Zwaag, M. Apel, P. Schaffnit and I. Steinbach, Analysis of the $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in a C-Mn Steel by Phase-field Modeling, *Metallurgical Materials Transactions A*, (2005), Vol. 36A, pp. 2327-2340.
- (105) M. G. Meozzi, J. Sietsma and S. van der Zwaag, Analysis of $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in a Nb Microalloyed C-Mn Steel by Phase Field Modelling, *Acta Materialia*, (2006), Vol. 54, pp.1431-1440.
- (106) Y. Wang and A. G. Khachaturyan, Three-dimensional Field Model and Computer Modeling of Martensitic Transformations, *Acta Materialia*, (1997), Vol.45, pp.759-773.
- (107) Y. M. Jin, A. Artemev and A. G. Khachaturyan, Three-dimensional Phase Field Model of Low-symmetry Martensitic Transformation in Polycrystal: Simulation of ζ'_2 Martensite in AuCd Alloys, *Acta Materialia*, (2001), Vol.49, pp.2309-2320.
- (108) T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids*, 2nd Rev. Ed., Kluwer Academic, (1991).

- (109) T. Koyama and H. Onodera, Phase-Field Simulation of Microstructure Changes in Ni₂MnGa Ferromagnetic Alloy Under External Stress and Magnetic Fields, *Materials Transactions*, (2003), Vol. 44, pp. 2503-2508.
- (110) X. H. Guo, S-Q. Shi and X. Q. Ma, Elastoplastic Phase Field Model for Microstructure Evolution, *Applied Physics Letters*, (2005), Vol. 87, pp.221910.
- (111) Z. Nishiyama, *Martensitic Transformations*, Academic Press Inc., New York, (1978).
- (112) S. Q. Shi, X. Q. Ma, X. N. Jing, X. H. Guo and L. Q. Chen, Phase Field Simulation of Hydrogen Diffusion and Hydride Formation Pattern in Zirconium, *Proc. 18th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology*, edited by Yu Zhou, et al., Atomic Energy Press, Beijing, China, (2005), pp. 186-197.
- (113) 富田佳宏, 弾塑性力学の基礎と応用, 森北出版, (1990), pp. 54-56.
- (114) K. W. Neal, *SM. Arch.*, (1981), Vol. 6, pp. 79-128.
- (115) 瀬口靖幸, 北川浩, 富田佳宏, 有限要素法の基礎, 日刊工業新聞社, (1983).
- (116) 富田佳宏, 数値弾塑性力学, 有限要素シミュレーション - 基礎と応用, 養賢堂, (1990).
- (117) 寺田賢二郎, 菊池昇, 均質化法入門, 計算力学レクチャーシリーズ, 丸善, (2003).
- (118) 榎本正人, Fe-C および Fe-C-X 合金における初析フェライトの核形成と成長, *鉄と鋼*, (1984), 第 70 巻, 14 号, pp. 19-28.
- (119) H. I. Aaronson, In the Decomposition of Austenite by Diffusional Processes, V. F. Zackay and H. I. Aaronson eds., Interscience, New York, (1962).
- (120) H. I. Aaronson, G. Spanos, R. A. Masamura, R. G. Vardiman, D. W. Moon, E. S. K. Menon and M. G. Hall, Sympathetic Nucleation : An Overview., *Materials Science and Engineering B*, (1995), Vol.32, pp.107-123.
- (121) W. W. Mullins and R. F. Sekerka, Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy, *Journal of Applied Physics.*, Vol.35, (1964), pp.444-451.

- (122) Z. K. Liu., Theoretic Calculation of Ferrite Growth in Supersaturated Austenite in Fe-C Alloy, *Acta Materialia*, (1996), Vol.44, pp.3855-3867.
- (123) Y. Ohmori, H. Ohtsubo, Y. C. Jung, S. Okaguchi and H. Ohtani, Morphology of Bainite and Widmanstätten Ferrite, *Metallurgical and Materials Transactions A*, (1994), Vol.25A, pp.1981-1989.
- (124) J. R. Yang, and L. C. Chang, The Effect of Stress on the Widmanstätten Ferrite Transformation, *Materials Science and Engineering A*, (1997), Vol.223, pp.158-167.
- (125) D. Phelan, N. Stanford and R. Dippenaar, In Situ Observations of Widmanstätten Ferrite Formation, *Materials Science and Engineering A*, (2005), Vol.407, pp.127-134.
- (126) G. Spanos, H. S. Fang, D. S. Sarma and H. I. Aaronson , Influence of Carbon Concentration and Reaction Temperature upon Bainite Morphology in Fe-C-2 Pct Mn Alloys, *Metallurgical Transactions A.*, (1990), Vol.21A, pp.1391-1411.
- (127) H. I. Aaronson, W. T. Reynolds, G. J. Shiflet and G. Spanos, Bainite Viewed Three Different Ways, *Metallurgical Transactions A*, (1990), Vol.21A, pp.1343-1379.
- (128) J. W. Christian, *The Theory of Transformation in Metals and Alloys* 2nd ed., Pergamon, Oxford, (1981), pp.476.
- (129) C. Zener, Theory of Growth of Spherical Precipitates from Solid Solution, *Journal of Applied Physics*, (1949), Vol.20, pp.950-953.
- (130) 古原忠, 鉄鋼材料における界面構造とエネルギー, *鉄と鋼*, (2003), 第89巻, 5号, pp.497-509.
- (131) M. G. Hall and H. I. Aaronson, Formation of Invariant Plate-Strain and Tent-Shaped Surface Reliefs by the Diffusional Ledge Mechanism, *Metallurgical and Materials Transactions A*, (1994), Vol. 25A, pp.1923-1931.

- (132) H. I. Aaronson, D. Eylon, C. M. Cooke, M. Enomoto and F. H. Froes, The Widmanstätten-start (Ws) Temperature, as Affected by Matrix grain size, in Ti-6 % Al-4 % V and Fe-C Alloys, *Scripta Metallurgica*, Vol.23, No.3 (1989), pp.435-440.
- (133) M. Enomoto, Thermodynamics and Kinetics of the Formation of Widmanstätten Ferrite Plates in Ferrous Alloys, *Metallurgical and Materials Transactions A*, (1994), Vol.25A, pp.1947-1995.
- (134) R. D. Townsend and J. S. Kirkaldy, Widmanstätten Ferrite Formation in Fe-C Alloys, *Transaction of ASM.*, Vol. 61, (1968), pp.605-619.
- (135) G. Kurdjumov and G. Sachs, Über den Mechanismus der Stahlhartung, *Zeitschrift für Physik*, (1930), Vol. 64, pp. 325.
- (136) 牧正志, 粒界変態生成物の形態と結晶学, 日本鉄鋼協会会報ふえらむ, (2007), 第12巻, 7号, pp. 463-467.
- (137) R. L. Ryder and W. Pitsch, The Crystallographic Analysis of Grain-boundary Precipitation, *Acta Metallurgica*, (1996), Vol. 14, pp. 1437-1448.
- (138) E. Novillo, D. Hernández, I. Gutiérrez and B. López, Analysis of Ferrite Grain Growth Mechanisms During $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in a Niobium Alloyed Steel Using EBSD, *Materials Science and Engineering A*, (2004), Vol. 385, pp. 83-90.
- (139) Z. Yang and R. A. Johnson, An EAM Simulation of the $\alpha - \gamma$ Iron Interface, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, (1993), Vol.1, pp. 707-716.
- (140) T. Nagano and M. Enomoto, Calculation of the Interfacial Energies Between α and γ Iron and Equilibrium Particle Shape, *Metallurgical Materials Transactions A*, (2006), Vol. 37A, pp. 929-937.
- (141) R. G. Thiessen, J. Sietsma, T. A. Palmer, J. W. Elmer and I. M. Richardson, Phase-field Modelling and Synchrotron Validation of Phase Transformations in Martensitic Dual-phase Steel, *Acta Materialia*, (2007), Vol. 55, pp. 601-614.

- (142) W. T. Read and W. Shockley, Dislocation Models of Crystal Grain Boundaries, *Physical Review*, (1950), Vol. 78, pp. 275-289.
- (143) P. J. Hurley and F. J. Humphreys, Modelling the Recrystallization of Single-phase Aluminium, *Acta Materialia*, (2003), Vol. 51, pp. 3779-3793.
- (144) T. A. Palmer and J. W. Elmer, Direct Observations of the Formation and Growth of Austenite from Pearlite and Allotriomorphic Ferrite in a C-Mn Steel Arc Weld, *Scripta Materialia*, (2005), Vol. 53, pp. 535-540.
- (145) C. Zener, Kinetics of the Decomposition of Austenite, *Transaction of AIME*, (1947), Vol.167, pp.550-595.
- (146) M. Hillert, The Role of Interfacial Energy during Solid State Phase Transformations, *Jernkontorets Annaler*, (1957), Vol.141, pp.757-789.
- (147) K. Nakajima, M. Apel and I. Steinbach, The Role of Carbon Diffusion in Ferrite on the Kinetics of Cooperative Growth of Pearlite: A Multi-phase Field Study, *Acta Materialia*, (2006), Vol. 54, pp. 3665-3672.
- (148) I. Steinbach and M. Apel, The Influence of Lattice Strain on Pearlite Formation in Fe-C, *Acta Materialia*, (2007), Vol. 55, pp. 4817-4822
- (149) 日本材料学会編, 改訂機械材料学 (2005), 日本材料学会, p.212.
- (150) Thermo-Calc, Thermo Calc software AB.
- (151) Thermo-Calc, Thermo Calc software AB. (I. Steinbach, Private Communications)
- (152) A. Schneider and G. Inden, Carbon Diffusion in Cementite (Fe_3C) and Hagg Carbide (Fe_5C_2), *Calphad*, (2007), Vol.31, pp.141-147.
- (153) M. Hillert, On Theories of Growth during Discontinuous Precipitation, *Metallurgical Transactions*, (1972), Vol. 3, pp.2729-2741.
- (154) G. F. Bolling and R. H. Richmann, Forced Velocity Pearlite, *Metallurgical Transactions*, (1970), Vol. 1, pp.2095-2104.

- (155) K. Hashiguchi and J. S. Kirkaldy, Pearlite Growth by Combined Volume and Phase Boundary Diffusion, *Scandinavian Journal of Metallurgy*, (1984), Vol. 13, pp. 240-248.
- (156) B. G. Mellor and D. V. Edmonds, Unidirectional Transformation of Fe-0.8C-Co Alloys: Part II. Kinetics of the Eutectoid Reaction, *Metallurgical Transactions A*, (1977), Vol. 8A, pp. 773-782.
- (157) N. Ridley, A Review of the Data on the Interlamellar Spacing of Pearlite, *Metallurgical Transactions A*, (1984), Vol. 15A, pp. 1019-1036
- (158) A. Shibata, S. Morito, T. Furuhashi and T. Maki, Local Orientation Change Inside Lenticular Martensite in Fe-33Ni Alloy, *Scripta Materialia*, (2005), Vol.53, pp.597-602.
- (159) S. Morito, X. Huang, T. Furuhashi, T. Maki and N. Hansen, The Morphology and Crystallography of Lath Martensite in Alloy Steels, *Acta Materialia*, (2006), Vol.54, pp.5323-5331.
- (160) G. R. Barsh and J. A. Krumhansl, Twin Boundaries in Ferroelastic Media without Interface Dislocations, *Physical Review Letters*, (1984), Vol.10, pp.1069-1072.
- (161) N. Gu, X. Song, J. Zhang, F. Yin and R. Wang, Effects of Self-Accommodation and Plastic Accommodation in Martensitic Transformations and Morphology of Martensites, *Metallurgical Materials Transactions A*, (1995), Vol.26A, pp.1979-1985.
- (162) S. R. Shenoy, T. Lookman, A. Saxena and A. R. Bishop, Martensitic Textures: Multiscale Consequences of Elastic Compatibility, *Physical Review B*, (1999), Vol.60, pp. 12537.
- (163) K. Ø. Rasmussen, T. Lookman, A. Saxena, A. R. Bishop, R. C. Albers and S. R. Shenoy, Three-Dimensional Elastic Compatibility and Varieties of Twins in Martensites, *Physical Review Letters*, (2001), Vol. 87, pp. 055704.

- (164) R. Ahlwalia, T. Lookman and A. Saxena, Dynamic Strain Loading of Cubic to Tetragonal Martensites, *Acta Materialia*, (2006), Vol.54, pp. 2109-2120.
- (165) A. Artemev, Y. Jin and A. G. Khachaturyan, Three-dimensional Phase Field Model of Proper Martensitic Transformation, *Acta Materialia*, (2001), Vol.49, pp.1165-1177.
- (166) W. Zhang, Y. M. Jin and A. G. Khachaturyan, Phase Field Microelasticity Modeling of Heterogeneous Nucleation and Growth in Martensitic Alloys, *Acta Materialia*, (2007), Vol.55, pp.565-574.
- (167) D. S. Lieberman, M. S. Wechsler and T. A. Read, Cubic to Orthorhombic Diffusionless Phase Change- Experimental and Theoretical Studies of AuCd, *Journal of Applied Physics*, (1955), Vol. 26, pp. 473-484.
- (168) J. Bowles and J. Mackenzie, The Crystallography of Martensitic Transformations, I., *Acta Metallurgica*, (1952), Vol. 2, pp.129-138.
- (169) H. Ledbetter and M. L. Dunn, Equivalence of Eshelby Inclusion Theory and Wechsler-Lieberman-Read, Bowles-Mackenzie Martensite-Crystallography Theories, *Materials Science and Engineering A*, (2000), Vol. 285, pp. 180-185.
- (170) 高木節雄, 津崎兼彰, *材料組織学*, 朝倉書店, (2000), pp. 138-140.
- (171) V. I. Levitas, A. V. Idesman, G. B. Olson and E. Stein, Numerical Modelling of Martensitic Growth in an Elastoplastic Material, *Philosophical Magazine A*, (2002), Vol. 82, pp. 429-462.
- (172) G. B. Olson and W. S. Owen, Symposium on New Aspects of Martensitic Transformations, The Japan Institute of Metals, (1976), pp. 105-109.
- (173) H. C. Ling and W. S. Owen, A Model of the Thermoelastic Growth of Martensite, *Acta Metallurgica*, (1981), Vol. 29, pp. 1721-1736.
- (174) Q. P. Meng, Y. H. Rong and T. Y. Hsu, Effect of Internal Stress on Autocatalytic Nucleation of Martensitic Transformation, *Metallurgical Materials Transactions A*, (2006), Vol. 37A, pp. 1405-1411.

- (175) G. Miyamoto, A. Shibata, T. Maki and T. Furuhashi, Precise Measurement of Accommodation Strain in Austenite Surrounding Martensite by Electron Backscatter Diffraction, Proceedings of the 1st International Symposium on Steel Science, (2007), in press.
- (176) M. Umemoto, E. Yoshitake and I. Tamura, The Morphology of Martensite in Fe-C, Fe-Ni-C and Fe-Cr-C Alloys, Journal of Materials Science, (1983), Vol. 18, pp. 2893-2904.
- (177) D. Srivastava, P. Mukhopadhyay, S. Banerjee and S. Ranganathan, Morphology and Substructure of Lath Martensites in Dilute Zr-Nb Alloys Materials Science and Engineering A, (2000), Vol. 288, pp. 101-110.
- (178) Y. Aydogdu and O. Adiguzel, Self-accommodating Martensite Plate Variants in Shape Memory CuAlNi Alloys, Journal of Materials Processing Technology, (2002), Vol. 123, pp. 498-500.
- (179) H. Kawata, K. Sakamoto, T. Moritani, S. Morito, T. Furuhashi and T. Maki, Crystallography of Ausformed Upper Bainite Structure in Fe-9Ni-C Alloys, Materials Science and Engineering A, (2006), Vol. 438-440, pp. 140-144.
- (180) T. Furuhashi, H. Kawata, S. Morito and T. Maki, Crystallography of Upper Bainite in Fe-Ni-C alloys, Materials Science and Engineering A, (2006), Vol. 431, pp. 228-236.
- (181) T. Koyama and H. Onodera, Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Based on the Phase-Field Method, Transactions of the Materials Research Society of Japan, (2004), Vol. 29, pp. 3775-3778.
- (182) T. Koyama and H. Onodera, Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cu-Mn-Ni Quaternary Alloy Based on the Phase-Field Method, Materials Transactions, (2005), Vol. 46, pp. 1187-1192.
- (183) T. Koyama, K. Hashimoto and H. Onodera, Phase-Field Simulation of Phase Transformation in Fe-Cu-Mn-Ni Quaternary Alloy, Materials Transactions, (2006), Vol. 47, pp. 2765-2772.

- (184) Y. Ni, Y. M. Jin and A. G. Khachaturyan, The Transformation Sequences in the Cubic \rightarrow Tetragonal Decomposition, *Acta Materialia*, (2007), Vol. 55, pp.4903-4914.
- (185) 高木節雄, 津崎兼彰, 材料組織学, 朝倉書店, (2000), pp. 115-116.
- (186) 日本金属学会編, 3.5 析出組織, 改訂6版金属便覧, 丸善, (2000), pp. 221-228.
- (187) M. Bouville and R. Ahluwalia, Interplay between Diffusive and Displacive Phase Transformations: Time-Temperature-Transformation Diagrams and Microstructures, *Physical Review Letters*, (2006), Vol. 97, pp. 055701.
- (188) M. Bouville and R. Ahluwalia, Effect of Lattice-mismatch-induced Strains on Coupled Diffusive and Displacive Phase Transformations, *Physical Review B*, (2007), Vol. 75, pp. 054110.
- (189) 石川信行, 末吉仁, 遠藤茂, 鹿内伸夫, フェライト-ベイナイト鋼の変形挙動に及ぼす組織形態の影響, *鉄と鋼*, (2005), Vol. 91, pp.21-27.
- (190) M. Nygård and P. Gudmundson, Micromechanical Modeling of Ferrite/pearlitic Steels, *Materials Science Engineering A*, (2002), Vol. 325, pp.435-443.
- (191) M. Nygård and P. Gudmundson, Three-dimensional Periodic Voronoi Grain Models and Micromechanical FE-Simulations of a Two Phase Steel, *Computational Materials Science*, (2002), Vol. 24, pp.513-519.
- (192) F. M. Al-Abbashi and J. A. Nemes, Characterizing DP-Steels using Micromechanical Modeling of Cells, *Computational Materials Science*, (2007), Vol. 39, pp. 402-415.
- (193) N. Ishikawa, D. M. Parks, S. Socrate and M. Kurihara, Micromechanical Modeling of Ferrite-Pearlite Steels using Finite Element Unit Cell Models, *ISIJ International*, (2000), Vol. 40, pp. 1170-1179.
- (194) Z. Huang and M. Yao, Effect of Arrangement of Acicular Ferrite in a Widmanstätten Microstructure on the Fracture of Mild Steel, *Materials Science and Engineering A*, (1989), Vol. 119A, pp. 211-217.

- (195) S. J. Hollister, J. M. Brennan and N. Kikuchi, Homogenization Sampling Procedure for Calculating Trabecular Bone Effective Stiffness and Tissue Level Stress, *Journal of Biomechanics*, (1994), Vol. 27, pp. 433-444.
- (196) 寺田賢二郎, 菊池昇, 複合材の均質化法解析のためのデジタル・イメージを利用した微視構造モデリング手法, (1998), *日本機械学会論文集 A 編*, 第 64 巻, 617 号, pp. 170-177.
- (197) 比嘉吉一, 富田佳宏, 多結晶金属材料の特徴長さ依存性挙動の数値シミュレーション, *日本機械学会論文集 A 編*, (2003), 第 69 巻, 679 号, pp. 523-529.
- (198) M. E. Gurtin and A. Needleman, Boundary Conditions in Small-deformation, Single-crystal Plasticity that Account for the Burgers Vector, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, (2005), Vol. 53, pp. 1-31.
- (199) P. Gustafson, Thermodynamic Evaluation of the Fe-C System, *Scandinavian Journal of Metallurgy*, (1985), Vol. 14, pp. 259-267.
- (200) M. Hillert and B. A. Sundman, Treatment of the Solute Drag on Moving Grain Boundaries and Phase Interfaces in Binary Alloys, (1975), *Acta Metallurgica*, Vol.24, pp.731-743.
- (201) N. A. Ahmad, Solute Trapping and Solute Drag in a Phase-field Model of Rapid Solidification, *Physical Review E*, (1998), Vol.58, pp.3436-3450.

付録 A

Ginzburg-Landau 型自由エネルギー汎関数の導出

Phase-Field 法による組織形成シミュレーションにおいて, 系の全自由エネルギーを定義するために用いる, Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数を導出し, 濃度場や規則度場に不均一性を有する系において生じる, 勾配エネルギーについて説明する.

界面領域において, 秩序変数である phase field ϕ が非常に急峻な分布をとり, 相変態により生成する相の界面が曲率を有する場合, 自由エネルギー密度 g を ϕ 以外に ϕ の分布形状の情報である ϕ の勾配 $\nabla\phi$ や曲率 $\nabla^2\phi$ などを独立変数とする関数形として定義する必要がある. したがって, $\nabla\phi$ や $\nabla^2\phi$ を独立変数として含んだ自由エネルギー密度 $g(\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi)$ を定義し, $\nabla\phi$ と $\nabla^2\phi$ についてテイラー展開すると, 次式を得る.

$$\begin{aligned} g(\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi) &= g(\phi, 0, 0) + L(\phi)(\nabla\phi) + K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2 \\ &\quad + K_3(\phi)(\nabla^2\phi)^2 + K_4(\phi)(\nabla\phi)(\nabla\phi)^2 + \dots \\ &\cong g(\phi, 0, 0) + L(\phi)(\nabla\phi) + K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2 \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

ここで, 2 次以上の高次項を省略した. 一次元的で左右対称の ϕ の分布を想定する. このとき中心位置の原点に対し左右反転の座標変換を施しても, 自由エネルギー密度は不変であるので, 次式が成立する.

$$\begin{aligned} g(\phi(x), \nabla\phi(x), \nabla^2\phi(x)) &= g(\phi(-x), \nabla\phi(-x), \nabla^2\phi(-x)) \\ &= g(\phi(x), -\nabla\phi(x), \nabla^2\phi(x)) \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

これを式 (A.1) に代入すると,

$$\begin{aligned}
& g(\phi, 0, 0) + L(\phi)(\nabla\phi) + K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2 \\
& = g(\phi, 0, 0) - L(\phi)(\nabla\phi) + K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2
\end{aligned} \tag{A.3}$$

となり, $L(\phi)$ は恒等的に零となる. したがって, 自由エネルギー密度は次式にて与えられる.

$$g(\phi, \nabla\phi, \nabla^2\phi) = g(\phi, 0, 0) + K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2 \tag{A.4}$$

ここで, $g(\phi, 0, 0)$ は界面が存在しない場合の自由エネルギー密度であり, すなわちバルクの化学的自由エネルギー密度に等しい. したがって, 界面が存在することで発生する付加的な自由エネルギーである勾配エネルギー G_{int} は,

$$G_{int} = \int_V \{K_1(\phi)(\nabla^2\phi) + K_2(\phi)(\nabla\phi)^2\} dV \tag{A.5}$$

で与えられる. さらに, 右辺の被積分項第1項にガウスの発散定理を用いると, 以下のようになる.

$$\begin{aligned}
\int_V K_1(\phi)(\nabla^2\phi)dV &= \int_S K_1(\phi) \{(\nabla^2\phi) \cdot \mathbf{n}\} dS - \int_V (\nabla K_1)(\nabla\phi)dV \\
&= \int_S K_1(\phi) \{(\nabla^2\phi) \cdot \mathbf{n}\} dS - \int_V \frac{\partial K_1}{\partial\phi} (\nabla\phi)^2 dV \\
&= - \int_V \frac{\partial K_1}{\partial\phi} (\nabla\phi)^2 dV
\end{aligned} \tag{A.6}$$

ここで, \mathbf{n} は界面の外向き法線ベクトルを表し, 外部からの寄与を無視して面積積分項は零としている. これを式 (A.5) に代入すると次式を得る.

$$\begin{aligned}
G_{int} &= \int_V \left(K_2(\phi) - \frac{\partial K_1}{\partial\phi} \right) (\nabla\phi)^2 dV \\
&= \int_V \kappa(\phi) (\nabla\phi)^2 dV
\end{aligned} \tag{A.7}$$

ここで, $\kappa(\phi)$ は勾配エネルギー係数であり, 次式のように置かれることが多い.

$$\kappa(\phi) = K_2(\phi) - \frac{\partial K_1}{\partial\phi} \equiv \frac{\epsilon^2}{2} \tag{A.8}$$

したがって, Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数は次式で表すことができる.

$$G = \int_V \left\{ g(\phi) + \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right\} dV \tag{A.9}$$

付録 B

Sharp interface limit による各種パラメータの導出

Phase-Field 法において、定量的な評価を行うためには、数値シミュレーションで用いる各種パラメータを材料の物性値に関係づける必要がある。本研究では、1次元平衡状態や定常成長状態における、非保存量の秩序変数 ϕ の時間発展方程式を考慮し、界面幅が零と仮定して得られる理論式や経験式に比較する極限操作 (Sharp interface limit) を行い、各種パラメータを導出する。

付録 A で導出した、Ginzburg-Landau 型の自由エネルギーを以下に示す。

$$G(\phi) = \int_V \left[g(\phi, u_c, T) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right] dV \quad (\text{B.1})$$

ここで、被積分関数第 2 項は付録 A で説明した勾配エネルギー密度。第 1 項はバルクの自由エネルギー密度を表し、本研究では次式のような秩序変数の関数形で表現する。

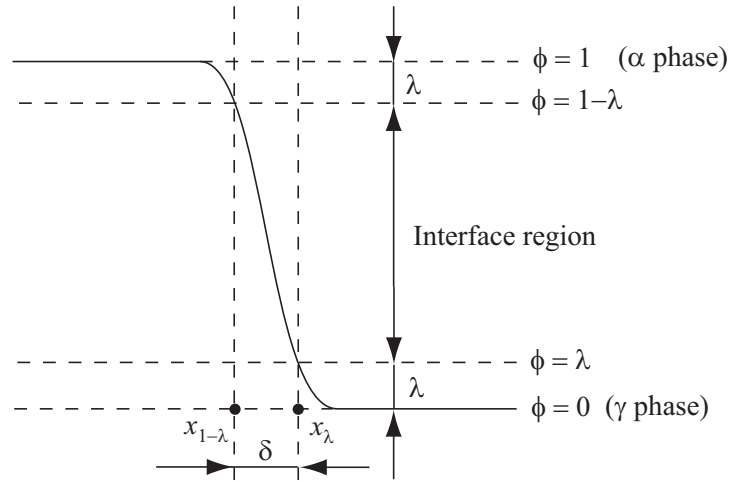
$$g(\phi, u_c, T) = p(\phi)g^\alpha(u_c, T) + (1 - p(\phi))g^\gamma(u_c, T) + Wq(\phi) \quad (\text{B.2})$$

ここで、 g^α と g^γ はそれぞれ α 相と γ 単相の化学的自由エネルギー密度であり、秩序変数と温度の関数である。また、 $p(\phi)$ と $q(\phi)$ は、それぞれエネルギー密度分布関数とエネルギー障壁の高さ W を有するダブルウェルポテンシャル関数であり、次式を用いる。

$$p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (\text{B.3})$$

$$q(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (\text{B.4})$$

Phase-Field 法では、秩序変数 ϕ が非保存量であれば、式 (B.1) を、式 (2.4) に代入することで次式の時間発展方程式が得られる。

Fig.B.1 α/γ interface

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M \left(\epsilon^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial g}{\partial \phi} \right) \quad (\text{B.5})$$

ここで, 式 (B.2) より,

$$\frac{\partial g}{\partial \phi} = (g^\alpha - g^\gamma) \frac{\partial p(\phi)}{\partial \phi} + W \frac{\partial q(\phi)}{\partial \phi} \quad (\text{B.6})$$

となる.

物性値として, 界面厚さ δ , 界面エネルギー σ を定義し, 1次元問題における平衡状態すなわち界面が動かない状態を仮定すると, 式 (B.5) より次式が成立する.

$$\epsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} - \frac{dg}{d\phi} = 0 \quad (\text{B.7})$$

また, 平衡状態 ($T = T_M$) においては, $g^\alpha(u_c, T_M) = g^\gamma(u_c, T_M)$ が成立するため,

$$\epsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} = W \frac{\partial q(\phi)}{\partial \phi} \quad (\text{B.8})$$

が得られる. さらに, 両辺に $d\phi/dx$ をかけて積分することにより, 次式に示す式 (B.7) を満たす解 $\phi(x)$ が求められる.

$$\phi = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{\sqrt{2W}}{2\epsilon} x \right) \quad (\text{B.9})$$

ここで, 図 B.1 に示すように界面領域を $\lambda < \phi < (1 - \lambda)$ とすると, 界面厚さ λ は次式のように記述できる.

$$\delta = x_\lambda - x_{1-\lambda} = \frac{\sqrt{2}\epsilon}{\sqrt{W}} 2 \tanh^{-1}(1 - \lambda) = \frac{\sqrt{2}\epsilon}{\sqrt{W}} b \quad (\text{B.10})$$

一方，平衡状態 ($T = T_M$) においては，系の全自由エネルギーは界面エネルギー σ に対応するので次式のように記述できる．

$$\sigma = G(\phi, T_M) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + g(\phi, T_M) \right] dx = \frac{\epsilon\sqrt{W}}{3\sqrt{2}} \quad (\text{B.11})$$

以上より，材料の各物性値から数値シミュレーションで使用する各種パラメーター ϵ , W は次式で表される．

$$\epsilon = \sqrt{\frac{3\delta\sigma}{b}} \quad (\text{B.12})$$

$$W = \frac{6\sigma b}{\delta} \quad (\text{B.13})$$

付録 C

Fe-C合金の化学的自由エネルギーの 熱力学パラメータ

本研究では Fe-C 合金の各相における化学的自由エネルギーに副格子モデルに基づく自由エネルギー関数を用いている。ここでは、自由エネルギー関数で使用する各熱力学パラメータについて説明する。まず、 α 相、 γ 相における、Fe 化合物の化学的自由エネルギーを、それぞれ以下に示す⁽¹⁹⁹⁾。

$$G_{Fe:Va}^{0\alpha} = 1224.83 + 124.134T - 23.5143T \log T \\ - 0.00439752T^2 - 5.89269 \times 10^{-8}T^3 + 77358.5T^{-1} \quad (C.1)$$

$$G_{Fe:C}^{0\alpha} = G_{Fe:Va}^{0\alpha} + 3G_C^{gra} + 322050 + 75.667T \quad (C.2)$$

$$G_{Fe:Va}^{0\gamma} = -237.57 + 132.416T - 24.6643T \log T \\ - 0.00375752T^2 - 5.89269 \times 10^{-8}T^3 + 77358.5T^{-1} \quad (C.3)$$

$$G_{Fe:C}^{0\gamma} = G_{Fe:Va}^{0\gamma} + 3G_C^{gra} + 77207 - 15.877T \quad (C.4)$$

で表される。ここで、炭素の自由エネルギーの基準をグラファイトとしているため、本研究では $G_C^{gra} = 0$ としている。また、各相の原子間相互作用パラメータは:

$$L_{Fe:C;Va}^{\alpha} = -190T \quad (C.5)$$

$$L_{Fe:C;Va}^{\gamma} = -34671 \quad (C.6)$$

α 固溶体の磁気過剰エネルギーは、

$\tau \geq T/1043$ のとき、

$$G_{mag} = -6507.7 \left(\frac{\tau^{-4}}{10} + \frac{\tau^{-14}}{315} + \frac{\tau^{-24}}{1500} \right) \quad (C.7)$$

$\tau \leq T/1043$ のとき,

$$G_{mag} = -9180.5 + 9.283T - 9309.8 \left(\frac{\tau^4}{6} + \frac{\tau^{10}}{135} + \frac{\tau^{16}}{600} \right) \quad (\text{C.8})$$

また, 以下に各相における炭素原子の易動度を示す⁽⁹⁴⁾⁽⁹⁵⁾.

$$M_c^\alpha = \frac{2.0 \times 10^{-6}}{RT} \exp\left(\frac{-10115}{T}\right) \exp\left[0.5898 \left\{1 + \frac{1}{\pi} \arctan\left(14.895 - \frac{15309}{T}\right)\right\}\right] \quad (\text{C.9})$$

$$M_c^\gamma = \frac{4.529 \times 10^{-7}}{RT} \left\{1 + u_c(1 - u_c) \frac{8339.9}{T}\right\} \exp\left\{-\left(\frac{1}{T} - 2.21 \times 10^{-4}\right) (17767 - 26436u_c)\right\} \quad (\text{C.10})$$

なお, 易動度の単位は m^2/s である.

付録D

Solute Drug効果を考慮した界面モビリティの導出

式(2.26)に示した ϕ の時間発展方程式のモビリティ M_ϕ を導出する。一次元の定常状態において界面が速度 V で移動している場合、炭素原子の拡散方程式と質量保存則から次式が得られる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_c}{\partial t} &= \frac{\partial u_c}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} \\ &= -V \frac{\partial u_c}{\partial x} \\ &= -v_m \frac{\partial J_c}{\partial x}\end{aligned}\tag{D.1}$$

ここで、 v_m はFe-C合金のモル体積、 J_c は炭素原子の拡散流束であり、上式を積分することで、以下ようになる。

$$J_c = \frac{V}{v_m} (u_c - u_c^\alpha)\tag{D.2}$$

ここで、 u_c^α は α/γ 界面の α 相における炭素濃度である。 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴い、界面領域付近において発生する炭素原子の偏析を引きずって界面が移動することによる自由エネルギー消費量(Solute drug効果)は、次式で表される⁽²⁰⁰⁾。

$$\Delta G^{diff} = -\frac{v_m}{V} \int_\delta J_c \frac{d\mu_c}{dx} dx\tag{D.3}$$

ここで、 $\mu_c (= \partial g / \partial u_c)$ は炭素原子の化学ポテンシャルである。式(D.3)に式(D.2)を代入すると、次式を得る。

$$\Delta G^{diff} = - \int_\delta (u_c - u_c^\alpha) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial g}{\partial u_c} \right) dx\tag{D.4}$$

一方, 界面の移動速度 V は界面移動による自由エネルギー変化量, すなわち界面移動の駆動力 ΔG^{inter} と比例関係にあり, α/γ 界面のモビリティ $M_{\alpha/\gamma}$ を用いて次式で表される.

$$V = M_{\alpha/\gamma} \Delta G^{inter} \quad (D.5)$$

また, $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う全自由エネルギー変化量 ΔG^{total} は, 界面移動と Solute drug 効果により消費される自由エネルギー量の和として表され, 平衡状態の自由エネルギー曲線において共通接線則から求められる自由エネルギー変化量すなわち変態駆動力 ΔG^{driv} に等しいことから, 次式が成立する.

$$\begin{aligned} \Delta G^{total} &= \Delta G^{inter} + \Delta G^{diff} \\ &= \Delta G^{driv} = g^\gamma - u_c^\gamma \left. \frac{\partial g^\gamma}{\partial u_c} \right|_{u_c=u_c^\gamma} - g^\alpha + u_c^\alpha \left. \frac{\partial g^\alpha}{\partial u_c} \right|_{u_c=u_c^\alpha} \\ &= g^\gamma - g^\alpha - (u_c^\gamma - u_c^\alpha) \left. \frac{\partial g^\gamma}{\partial u_c} \right|_{u_c=u_c^\gamma} \end{aligned} \quad (D.6)$$

ここで, g^γ および g^α はそれぞれ γ 相, α 相の化学的自由エネルギー, u_c^α と u_c^γ はそれぞれ α 相と γ 相の平衡組成である. なお, 平衡状態においては局所平衡が満たされているとすれば α 相, γ 相の化学ポテンシャルは等しくなるので,

$$\left. \frac{\partial g^\gamma}{\partial u_c} \right|_{u_c=u_c^\gamma} = \left. \frac{\partial g^\alpha}{\partial u_c} \right|_{u_c=u_c^\alpha} \quad (D.7)$$

を考慮している.

次に, 一次元の定常状態において界面が速度 V で移動している場合を考えると, Phase-field 方程式 (2.17) より次式が成立する.

$$\frac{d\phi}{dt} = -M_\phi \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} - \epsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} \right) = -V \frac{d\phi}{dx} \quad (D.8)$$

両辺に $d\phi/dx$ をかけて, 界面領域で積分すると次式のようになる.

$$\int_\delta M_\phi \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \frac{d\phi}{dx} - \epsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} \frac{d\phi}{dx} \right) dx = V \int_\delta \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 dx \quad (D.9)$$

ここで, 上式左辺の被積分項第 2 項は, 定常状態における界面領域での ϕ の分布を考慮することで零となる. さらに, 被積分項第 1 項に関しては, 次式のように展開できる

$$\begin{aligned}
\int_{\delta} \left(\frac{\partial g}{\partial \phi} \frac{d\phi}{dx} \right) dx &= \int_{\delta} \left(\frac{dg}{dx} - \frac{\partial g}{\partial u_c} \frac{du_c}{dx} \right) dx \\
&= \int_{\delta} \frac{dg}{dx} dx - \int_{\delta} \frac{\partial g}{\partial u_c} \frac{du_c}{dx} dx \\
&= [g]_{\delta} - \int_{\delta} \left(\frac{\partial g}{\partial u_c} \frac{d(u_c - u_c^{\alpha})}{dx} \right) dx \\
&= [g]_{\delta} - \left[(u_c - u_c^{\alpha}) \frac{\partial g}{\partial u_c} \right]_{\delta} + \int_{\delta} (u_c - u_c^{\alpha}) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial g}{\partial u_c} \right) dx \\
&= g^{\gamma} - g^{\alpha} - (u_c^{\gamma} - u_c^{\alpha}) \frac{\partial g^{\gamma}}{\partial u_c} \Big|_{u_c=u_c^{\gamma}} - \Delta G^{diff} \\
&= \Delta G^{drive} - \Delta G^{diff} \\
&= \Delta G^{inter}
\end{aligned} \tag{D.10}$$

また, 式 (D.9) の右辺に関しては, 界面領域における phase field ϕ の分布が平衡状態と同じとすると, 次式で表される.

$$\frac{d\phi}{dx} = -\frac{\sqrt{2W}}{\epsilon_0} \phi(1-\phi) \tag{D.11}$$

式 (D.11) の両辺に $d\phi/dx$ をかけて界面領域で積分すると, 以下のようになる.

$$\begin{aligned}
\int_{\delta} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 dx &= \int_{\delta} \left\{ -\frac{\sqrt{2W}}{\epsilon_0} \phi(1-\phi) \right\}^2 \left\{ -\frac{\sqrt{2W}}{\epsilon_0} \phi(1-\phi) \right\}^{-1} d\phi \\
&= -\frac{\sqrt{2W}}{\epsilon_0} \int_1^0 \{\phi(1-\phi)\} d\phi \\
&= \frac{\sqrt{2W}}{6\epsilon_0}
\end{aligned} \tag{D.12}$$

したがって, 式 (D.9) に, 式 (D.10) および式 (D.12) を代入し, 比較することにより次式が得られる.

$$M_{\phi} \Delta G^{inter} = V \frac{\sqrt{2W}}{6\epsilon_0} \tag{D.13}$$

さらに, 式 (D.13) と式 (D.5) より V を消去すると, phase field の易動度 M_{ϕ} と α/γ 界面の易動度 $M_{\alpha/\gamma}$ は次式で関係付けることができる.

$$M_{\phi} = \frac{\sqrt{2W}}{6\epsilon_0} M_{\alpha/\gamma} \tag{D.14}$$

付録 E

Multi-Phase-Field 法におけるパラメータの導出

Multi-Phase-Field 法において，定量的な評価を行うためには，数値シミュレーションで用いる各種パラメータを材料の物性値に関係づける必要がある．本研究では，一次元定常状態における式 (2.113) の秩序変数 ϕ_i の時間発展方程式を考慮し，各パラメータを決定する．

$N = 2$ かつ $n = 2$ の場合を考える．このとき，式 (2.113) より次式が導かれる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} &= - \sum_{j=1}^2 \frac{M_{1j}^\phi}{2} \left[\sum_{k=1}^2 \left((W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right) - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \\ &= - \frac{M_{12}^\phi}{2} \left[(-W_{21}) \phi_1 + (W_{12}) \phi_2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (-a_{21}^2) \nabla^2 \phi_1 + \frac{1}{2} (a_{12}^2) \nabla^2 \phi_2 - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_1 \phi_2} \Delta E_{12} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

ここで， $a_{ij} = a_{ji}$ ， $W_{ij} = W_{ji}$ を考慮し，さらに表記を簡単にするため， $a = a_{12} = a_{21}$ ， $W = W_{12} = W_{21}$ ， $M^\phi = M_{12}^\phi$ ， $\Delta E = \Delta E_{12}$ ， $\phi_1 = \phi$ ， $\phi_2 = 1 - \phi$ とすると，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= - \frac{M^\phi}{2} \left[W (1 - 2\phi) - a^2 \nabla^2 \phi - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi (1 - \phi)} \Delta E \right] \\ &= \frac{M^\phi}{2} \left[a^2 \nabla^2 \phi - W \frac{dg(\phi)}{d\phi} + \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi (1 - \phi)} \Delta E \right] \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

が得られる．ここで， $g = \phi(1 - \phi)$ とした．

また，式 (2.94) から同様に以下を得る．

$$G = \int_V \left\{ \frac{a^2}{2} (\nabla \phi)^2 + W \phi (1 - \phi) \right\} dV \quad (\text{E.3})$$

変態駆動力 $\Delta E = 0$ とし，一次元定常状態を考えると，式 (E.2) は次式で表される．

$$a^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} = W \frac{dg(\phi)}{d\phi} \quad (\text{E.4})$$

両辺に $d\phi/dx$ をかけて x で積分し, $\phi = 0$ のとき, $d\phi/dx = 0$, $g(0) = 0$ であることを考慮すると,

$$\frac{d\phi}{dx} = -\frac{\sqrt{2W}}{a} \sqrt{g(\phi)} \quad (\text{E.5})$$

が得られる. さらに, 式 (E.5) を界面領域で積分すると, 式 (E.4) を満たす ϕ の解

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\sqrt{2W}}{a} x \right) \right] \quad (\text{E.6})$$

が得られる. したがって,

$$x = \frac{a}{\sqrt{2W}} \sin^{-1}(-2\phi + 1) \quad (\text{E.7})$$

である. よって, 界面領域を $\tau < \phi < 1 - \tau$ の領域としたときの, 界面幅を δ とすると, 次式が成立する.

$$\begin{aligned} \delta &= x_\tau - x_{1-\tau} \\ &= \frac{a}{\sqrt{2W}} \sin^{-1}(-2\tau + 1) - \frac{a}{\sqrt{2W}} \sin^{-1}(-2(1 - \tau) + 1) \\ &= \frac{a}{\sqrt{2W}} \left\{ \sin^{-1}(-2\tau + 1) - \sin^{-1}(2\tau - 1) \right\} \\ &= \frac{2a}{\sqrt{2W}} \sin^{-1}(-2\tau + 1) \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

ゆえに,

$$\delta = \frac{ab}{\sqrt{2W}} \quad (\text{E.9})$$

ここで,

$$b = 2 \sin^{-1}(-2\tau + 1) \quad (\text{E.10})$$

とした. したがって, $0 < \phi < 1$ の領域を界面とすれば, 界面幅は次式のように定義できる.

$$\delta = \frac{\pi a}{\sqrt{2W}} \quad (\text{E.11})$$

一方, 式 (E.1) と式 (E.5) より, 界面エネルギー σ は次式のように表される.

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \left\{ \frac{a^2}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + Wg(\phi) \right\} dx \\ &= 2W \int g(\phi) dx \\ &= -\frac{a\sqrt{W}}{4\sqrt{2}} \pi \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

さらに, 一次元定常状態を仮定すると, 式 (E.2) と式 (E.5) より, 次式が成り立つ .

$$\frac{d\phi}{dt} = M^\phi \frac{4}{\pi} \sqrt{\phi(1-\phi)} \Delta E \quad (\text{E.13})$$

また, 成長速度 V の定常成長を仮定すると次式が成り立つ .

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{d\phi}{dx} \frac{dx}{dt} = -V \frac{d\phi}{dx} \quad (\text{E.14})$$

式 (E.13) と式 (E.14) より,

$$-V \frac{d\phi}{dx} = M^\phi \frac{4}{\pi} \sqrt{\phi(1-\phi)} \Delta E \quad (\text{E.15})$$

であるので, 両辺に $d\phi/dx$ を掛けて, x で積分し, 式 (E.5) を代入すると,

$$\begin{aligned} -V \int \frac{d\phi}{dx} \frac{d\phi}{dx} dx &= M^\phi \frac{4}{\pi} \Delta E \int \sqrt{\phi(1-\phi)} \frac{d\phi}{dx} dx \\ \Leftrightarrow -V \int \frac{d\phi}{dx} d\phi &= M^\phi \frac{4}{\pi} \Delta E \int \sqrt{\phi(1-\phi)} d\phi \\ \Leftrightarrow V \frac{\sqrt{2W}}{a} \int \sqrt{g(\phi)} d\phi &= M^\phi \frac{4}{\pi} \Delta E \int \sqrt{\phi(1-\phi)} d\phi \\ \Leftrightarrow V \frac{\sqrt{2W}}{a} &= M^\phi \frac{4}{\pi} \Delta E \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

ゆえに, 次式が得られる.

$$V = M^\phi \frac{a}{\sqrt{2W}} \frac{4}{\pi} \Delta E \quad (\text{E.17})$$

ここで, 界面のモビリティを M とすると, $V = M\Delta E$ であるので, 式 (E.17) との比較により,

$$M = M^\phi \frac{a}{\sqrt{2W}} \frac{4}{\pi} \quad (\text{E.18})$$

が得られる.

以上で導出される, 式 (E.11), 式 (E.12), 式 (E.18) を一般化することで, 数値シミュレーションで使用する各種パラメータは次式のように物性値と関連付けることができる .

$$W_{ij} = \frac{4\sigma_{ij}}{\delta} \quad (\text{E.19})$$

$$a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\sigma_{ij}} \quad (\text{E.20})$$

$$M_{ij}^\phi = \frac{\pi^2}{4\delta} M_{ij} \quad (\text{E.21})$$

付録F

アダプティブ法による数値解析の効率化

本研究において、 α 相の存在確率を表す秩序変数 phase field ϕ は、 α 相においては $\phi = 1$ 、 γ 相においては $\phi = 0$ の一定値となり、狭い界面領域においてのみ変化する。また、界面領域における炭素濃度変化は急峻であり、かつ変態挙動に大きく影響をするため、界面領域では細かい要素分割を行い、精度よく解析しなければならない。しかしながら、全解析領域を細かいレギュラーメッシュで要素分割すると計算時間が膨大になり、効率的な解析を行うことができない。そこで本研究では、界面領域付近では細かい要素を用い、それ以外の領域では粗い要素を用いるアダプティブ法⁽⁴²⁾を用いる。

アダプティブ法では、秩序変数の phase field ϕ の値と炭素濃度 u_c の勾配で要素の細分化と粗大化の条件を設定し、要素分割を制御する。本研究では、解析結果がメッシュの分割に依存することを防ぐために、事前に要素の細分化の条件を変化させて予備計算を行い、phase field ϕ の値と炭素濃度 u_c の勾配の平均値が、

$$0.01 \leq \phi_{ave} \leq 0.9 \quad (\text{F.1})$$

$$|\nabla u_c|_{ave} \geq 0.3 \quad (\text{F.2})$$

のいずれかの条件を満たした場合に要素の細分化を行い、これ以外の条件では要素の粗大化を行う。

図 F.1(a) に、要素サイズのレベル数 4 におけるアダプティブメッシュの一例を示す。このとき、最大要素サイズを Level 0 要素、最小要素サイズを Level 3 要素としている。要素番号 1 で示す Level 0 要素を親要素とし、この要素を細分化した場合、要素番号 2 ~ 4 で示す大きさの 4 つの Level 1 要素が子要素として生成される。さらに、要素細分化の条件を満たした要素において、同様な要素細分化を繰り返すことで、界面領域にお

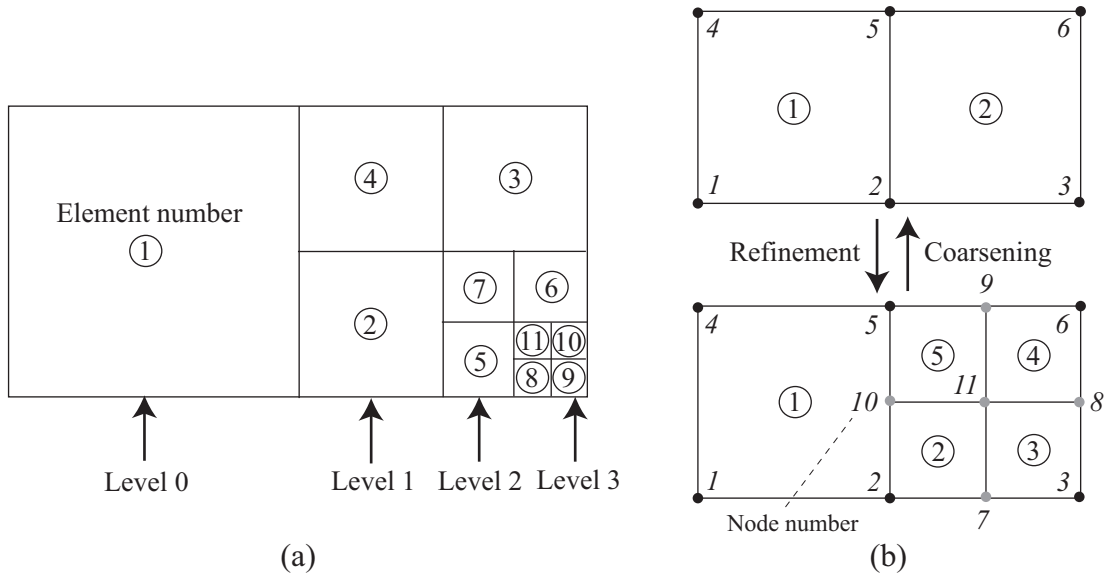


Fig.F.1 Adaptive mesh method ; (a) Adaptive mesh and (b) element refinement and coarsening.

いてのみ、要素番号 8 ~ 11 のような最小要素を用いる。ただし、要素細分化は、隣り合う要素のレベル数の差が 1 以下になるように行う。要素の粗大化は、同じレベル数に属する子要素がすべて粗大化の条件を満たした場合にのみ行う。

図 F.1(b) に、要素の細分化と粗大化による節点の生成、消滅の過程を示す。要素番号 2 の親要素を細分化すると、要素番号 2 ~ 5 の子要素および新しい節点番号 7 ~ 11 (以後、このような節点を hanging node と記述する) が生成する。ここで、節点番号 10 の存在を許容するため、次に示す方法により節点番号 10 の自由度を消去する。節点番号 10 の phase field ϕ_{10} を、節点番号 2 および 5 における phase field の値を用いて次式で定義する。

$$\phi_{10} = \frac{\phi_2 + \phi_5}{2} \tag{F.3}$$

このとき、要素番号 2 における phase-field 方程式 (2.67) を、以下に示す。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^{t+dt} \\ \phi_7^{t+dt} \\ \phi_{11}^{t+dt} \\ \phi_{10}^{t+dt} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^t \\ \phi_7^t \\ \phi_{11}^t \\ \phi_{10}^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_{\phi_2} \\ f_{\phi_7} \\ f_{\phi_{11}} \\ f_{\phi_{10}} \end{Bmatrix} \tag{F.4}$$

ここで、 a_{ij} と b_{ij} はそれぞれ式 (2.68) と式 (2.69) 中のマトリクス $[K_\phi^A]$, $[K_\phi^B]$ の成分を表している。また、各ベクトル内の下付き添え字は、要素番号 2 に属する節点番号であ

る. 式 (F.3) を式 (F.4) に代入することにより, 次式を得る.

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} a_{11} + a_{14}/2 & a_{12} & a_{13} & a_{14}/2 \\ a_{21} + a_{24}/2 & a_{22} & a_{23} & a_{24}/2 \\ a_{31} + a_{34}/2 & a_{32} & a_{33} & a_{34}/2 \\ a_{41} + a_{44}/2 & a_{42} & a_{43} & a_{44}/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^{t+dt} \\ \phi_7^{t+dt} \\ \phi_{11}^{t+dt} \\ \phi_5^{t+dt} \end{Bmatrix} \\
 = & \begin{bmatrix} b_{11} + b_{14}/2 & b_{12} & b_{13} & b_{14}/2 \\ b_{21} + b_{24}/2 & b_{22} & b_{23} & b_{24}/2 \\ b_{31} + b_{34}/2 & b_{32} & b_{33} & b_{34}/2 \\ b_{41} + b_{44}/2 & b_{42} & b_{43} & b_{44}/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_2^t \\ \phi_7^t \\ \phi_{11}^t \\ \phi_5^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} f_{\phi 2} \\ f_{\phi 7} \\ f_{\phi 11} \\ f_{\phi 10} \end{Bmatrix} \\
 & \tag{F.5}
 \end{aligned}$$

このマトリクス操作を, 要素番号 5 に対しても行い, 節点番号 10 の自由度を消去する. 同様の操作を要素細分化により生成する全ての hanging node に対して行う. さらに, 炭素濃度 u_c に対しても同様の作業を行う. なお, 以上の操作により各マトリクスは非対称マトリクスになるため, 連立一次方程式は双共役勾配法を用いて解いている.

付録 G

関連学術論文・学術講演

(1) 学術論文

第 1 章, 第 2 章

- 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, 静的な一次再結晶過程の Phase-field モデルと解析手順の構築, 日本機械学会論文集 A 編, (2007), 第 73 巻, 728 号, pp.482-489.
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Phase-Field Modeling and Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grains, Materials Science Forum, (2007), Vols.558-559, pp.1195-1200.
- T. Takaki, Y. Yamanaka, Y. Higa and Y. Tomita, Phase-Field Model during Static Recrystallization based on Crystal-Plasticity Theory, Journal of Computer-Aided Materials Design, (2007), Vol. 14, pp.75-84.

第 3 章

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Simulation of Austenite to Ferrite Transformation and Widmanstätten Ferrite Formation in Fe-C Alloy, Materials Transactions, (2006), Vol. 47, No 11, pp.2725-2731
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field 法による Fe-C 合金の変態と炭素拡散挙動の評価, 日本機械学会論文集 A 編, (2007), 第 73 巻, 726 号, pp.209-215.
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Fe-C 合金における Widmanstätten フェライト形成過程の Phase-field シミュレーション, 日本機械学会論文集 A 編, (2006), 第 72 巻, 723 号, pp.1676-1683.

第4章

- A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Multi-Phase-Field Modeling of Diffusive Solid Phase Transition in Carbon Steel during Continuous Cooling Transformation, *Journal of Crystal Growth*, (2008), Vol. 310, pp. 1337-1342

第6章

- A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Elastoplastic Phase-Field Simulation of Self- and Plastic Accommodations in Cubic - Tetragonal Martensitic Transformation, *Materials Science and Engineering A*, (2008), in press.

第8章

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Simulation of Morphological Change of Ferrite during Decomposition of Austenite in Fe-C Alloy, *Key Engineering Materials*, (2007), Vol.345-346, pp.935-938
- A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita, Coupled Simulation of Microstructural Formation and Deformation Behavior of Ferrite-Pearlite Steel by Phase-Field Method and Homogenization Method, *Materials Science and Engineering A*, (2008), Vol.480, pp.244-252.

(2) 国際会議論文

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Elastoplastic Phase-Field Model of Martensitic Transformation, *Proceedings of Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics*, (2007), CD-ROM, MS28-2-4, pp.1-9.
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-Field Simulation Based on The Predicted Subgrain Structures, *Proceedings of Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics*, (2007), CD-ROM, MS31-6-1, pp.1-9.
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Numerical Modeling of Microstructural Formation and Deformation Behavior of Fe-C Alloy by Phase-field Method and Homogenization Method, *Proceedings of International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and Their Applications 2007*, (2007), CD-ROM, pp.213-221.

- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Phase-Field Modeling for Dynamic Recrystallization, Proceedings of International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and Their Applications 2007, (2007), CD-ROM, pp.223-231.
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Simulation of Isothermal Transformation in Fe-C Alloy, Proceedings of the 12th International Conference on Plasticity and its Current Applications, (2006), CD-ROM, pp.478-480.
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka, Yoshikazu Higa and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-field Simulation Coupled with Crystal Plasticity Theory, Proceedings of the 12th International Conference on Plasticity and its Current Applications, (2006), CD-ROM, pp.469-471.
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Analysis of Austenite to Ferrite Transformation and Partitioning of Carbon in Fe-C Alloy, Proceedings of International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences, (2005), CD-ROM, pp.1312-1317.
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-Field Simulation Coupled with Crystal Plasticity Finite Element Method, Proceedings of International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences, (2005), CD-ROM, pp.1299-1304.

(3) 国外学術講演

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Elastoplastic Phase-Field Model of Martensitic Transformation, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM'07), (December 3-6, 2007, Kyoto, Japan).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-Field Simulation Based on The Predicted Subgrain Structures, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM'07), (December 3-6, 2007, Kyoto, Japan)

- A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita , Multi-Phase-Field Modeling of Diffusive Solid Phase Transition in Carbon Steel during Continuous Cooling Transformation, 15th International Conference on Crystal Growth (ICCG15), (August 12-17, 2007, Salt Lake City, USA)
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Numerical Modeling of Microstructural Formation and Deformation Behavior of Fe-C Alloy by Phase-field Method and Homogenization Method, International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and Their Applications 2007 (ATEMA2007), (August 6-10, 2007, Montreal, Canada).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Phase-Field Modeling for Dynamic Recrystallization, International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and Their Applications 2007 (ATEMA2007), (August 6-10, 2007, Montreal, Canada).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Phase-Field Modeling and Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grains, The 3rd International Conference on Recrystallization and Grain Growth, (June 10-15, 2007, Jeju island, Korea)
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Simulation of Morphological Change of Ferrite during Decomposition of Austenite in Fe-C Alloy, 10th International Conference on The Mechanical Behavior of Materials (ICM10), (May 27-31, 2007, Busan, Korea).
- T. Takaki, M. Asanishi, A. Yamanaka and Y. Tomita, Phase-field Simulation during Spherulite Formation of Polymer, 10th International Conference on The Mechanical Behavior of Materials (ICM10), (May 27-31, 2007, Busan, Korea).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Simulation using Phase-field Model Based on Crystal Plasticity Theory, Third International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2006), (September 18-22, 2006, Freiburg, Germany)

- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Simulation of Isothermal Transformation in Fe-C Alloy, International Conference on PLASTICITY'06, (July 17-22, 2006. Halifax, Nova Scotia, Canada).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka, Yoshikazu Higa and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-field Simulation Coupled with Crystal Plasticity Theory, International Conference on PLASTICITY'06, (July 17-22, 2006. Halifax, Nova Scotia, Canada).
- Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita, Phase-field Analysis of Austenite to Ferrite Transformation and Partitioning of Carbon in Fe-C Alloy, International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences (ICCES'05), (December, 1-6, 2005, Chennai, India).
- Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka and Yoshihiro Tomita, Static Recrystallization Phase-Field Simulation Coupled with Crystal Plasticity Finite Element Method, International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences(ICCES'05), (December, 1-6, 2005, Chennai, India).

(4) 国内学術講演

- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 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, 第 57 期日本材料学会学術講演会講演論文集, pp.211-212, (2008 年 5 月 23-25 日, 鹿児島大学).
- 山本隆史, 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 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, 第 57 期日本材料学会学術講演会講演論文集, pp.213-214, (2008 年 5 月 23-25 日, 鹿児島大学)
- 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, 結晶塑性解析に基づくサブグレイン組織予測と再結晶シミュレーション, 第 57 期日本材料学会学術講演会講演論文集, pp.209-210, (2008 年 5 月 23-25 日, 鹿児島大学)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 均質化有限要素法および Phase-Field 法による組織・力学特性評価手法の構築, 日本鉄鋼協会第 155 回春季講演大会討論会, 材料とプロセス, (2008), Vol. 21, pp.377-380, (2008 年 3 月 26-28 日, 武蔵工業大学)

- 山本隆史, 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Multi-Phase-Field 法による炭素鋼のパーライト変態シミュレーション, 日本機械学会関西支部平成 19 年度卒業研究発表講演会講演前刷り集 pp.1-5, (2008 年 3 月 17 日, 大阪大学)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, マルテンサイト変態による組織形成過程の Phase-Field シミュレーション, 日本機械学会第 20 回計算力学講演会講演論文集, pp. 515-516, (2007 年 11 月 26-28 日, 同志社大学)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 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, 日本鉄鋼協会第 154 回秋季講演大会, 第 16 回ヤングサイエンティストフォーラムアブストラクト集, (2007 年 9 月 19-21 日, 岐阜大学)
- 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, 自発的な核生成を考慮した静的再結晶 Phase-field モデルの検討, 第 56 期日本材料学会学術講演会講演論文集, pp.221-222, (2007 年 5 月 19-20 日, 名古屋大学)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field 法と均質化法による Fe-C 合金の組織・強度評価シミュレーション, 日本鉄鋼協会第 153 回春季講演大会第 15 回ヤングサイエンティストフォーラム講演概要集, (2007 年 3 月 27-29 日, 千葉工業大学).
- 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, Phase-field 法と結晶塑性論を用いた再結晶組織予測, 日本鉄鋼協会第 153 回春季講演大会 第 15 回ヤングサイエンティストフォーラム講演概要集, (2007 年 3 月 27-29 日 千葉工業大学).
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 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, 日本機械学会関西支部 第 82 期定期総会講演会講演論文集, pp.3-5, (2007 年 3 月 15 日, 大阪産業大学).
- 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, 動的再結晶過程の Phase-Field モデリング, 日本機械学会関西支部 第 82 期定期総会講演会講演論文集, pp.3-6, (2007 年 3 月 15 日, 大阪産業大学)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field 法と均質化法による炭素鋼の組織形成および変形挙動評価, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, pp. 467-468, (2007 年 3 月 7-9 日 日本学術会議, 東京).

- 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, Phase-field 法と結晶塑性論を用いた動的再結晶モデルの構築, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, pp.465-466, (2007 年 3 月 7-9 日 日本学術会議, 東京)
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Fe-C 合金の 変態による組織形成 Phase-field シミュレーション, 日本機械学会 第 19 回計算力学講演会講演論文集, pp.395-396, (2006 年 11 月 3-5 日 名古屋大学).
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 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, 第 55 期日本材料学会学術講演会論文集, pp.383-384, (2006 年 5 月 26-28 日 長岡科学技術大学).
- 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, ひずみ勾配結晶塑性論に基づく再結晶粒の生成と成長シミュレーション, 第 55 期日本材料学会学術講演会論文集, pp.385-386, (2006 年 5 月 26-28 日 長岡技術科学大学).
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field 法による Fe-C 合金の等温変態シミュレーション, 日本鉄鋼協会 第 151 回春季講演大会 学生ポスターセッションアブストラクト集, pp.18, (2006 年 3 月 21-23 日 早稲田大学).
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field 法による Fe-C 合金の等温変態シミュレーション, 日本機械学会第 18 回計算力学講演会講演論文集, pp.861-862, (2005 年 11 月 19-21 日 筑波大学).
- 高木知弘, 山中晃徳, 富田佳宏, Phase-field 法と結晶塑性有限要素法による再結晶微視組織形成シミュレーション, 日本機械学会第 18 回計算力学講演会講演論文集, pp.875-876, (2005 年 11 月 19-21 日 筑波大学).
- 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, Fe-C 合金の 変態フェーズフィールドシミュレーション, 第 49 回 日本学術会議材料研究連合講演会講演論文集, pp.149-150, (2005 年 9 月 15-16 日 京都大学).
- 山中晃徳, 斉藤賢司, 富田佳宏, 鉄鋼のベイナイト変態と炭素拡散挙動に関する研究, 日本機械学会関西支部卒業研究発表講演会, (2005 年 3 月 17 日 京都大学).

(5) 各種受賞

- 2007 年度神戸大学 KTC 機械クラブ (KTCM) 坂口忠司研究奨励賞, 神戸大学工学振興会機械クラブ.
- Student Paper Award, Elastoplastic Phase-Field Model of Martensitic Transformation, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with Eleventh International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Sciences (APCOM '07).
- 2006 年度 日本機械学会三浦賞, 日本機械学会.
- 日本材料学会第 55 期優秀講演発表賞, 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, 日本材料学会.
- 日本鉄鋼協会第 151 回春季講演大会学生ポスターセッション努力賞, Fe-C 合金における Widmanstätten フェライト形成の Phase-field シミュレーション, 日本鉄鋼協会.
- 平成 16 年度 日本機械学会関西支部卒業研究発表講演会 ベストプレゼンテーション賞, 鉄鋼のベイナイト変態と炭素拡散挙動に関する研究, 日本機械学会.

謝 辞

本研究は、著者が神戸大学大学院自然科学研究科機械・システム科学専攻に在学中に、神戸大学大学院工学研究科 富田佳宏教授の御指導のもと行ったものであります。富田佳宏教授には終始、懇切丁寧な御指導を賜るとともに、貴重な研究発表の機会や素晴らしい研究環境を提供して頂きましたことに深甚な感謝の意を表します。

本論文の執筆に際しましては、御多忙中にも関わらず御校閲を賜り、有益な御教示を頂きました神戸大学大学院工学研究科 中井善一教授、保田英洋教授、富山明男教授、京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科 高木知弘准教授に心より厚く御礼申し上げます。

神戸大学大学院工学研究科 長谷部忠司准教授、屋代如月准教授には貴重な御助言と有益な議論を賜りました。心より感謝の意を表します。また、古宇田由夫技術職員には、常に研究活動が円滑に行えるよう、数々の便宜をはかって頂きました。ここに深く感謝いたします。

本研究を遂行するにあたり、著者が博士前期課程に在籍時から、日々の研究活動全般において常に激励して頂き、丁寧な御指導と有益な御助言を賜りました高木知弘准教授には、改めて言葉に尽くせぬ感謝の意を表します。

著者が本研究を進めるうえで、物質・材料研究機構 計算科学センター 小山敏幸博士、諏訪嘉宏博士(現 新日本製鐵株式会社)、JEF スチール株式会社 中島勝己博士には、Phase-Field 法に関する極めて貴重な御指導と御助言を賜りました。心から感謝致します。

本研究では、平成 19 年から 20 年にわたり、日本学術振興会特別研究員 DC1 に対する文部省科学研究費補助金(特別研究員奨励費)の援助のもとに行われました。ここに記して謝意を表します。

神戸大学大学院工学研究科 固体力学研究室において、互いに切磋琢磨し、心の支えであった、同輩の西村正臣氏、東圭介氏(現 西日本旅客鉄道株式会社)、仙波愛弓氏(現 株式会社日本航空インターナショナル)、中島裕介氏(現 川崎重工業株式会社)、藤野佑一氏(現 サントリー株式会社)、金井泰寛氏(現 東洋ゴム工業株式会社)、川崎未生氏(現 株式会社 モリタ)に感謝致します。また、本研究の共同研究者として、共に Phase-Field 法に関する研究を遂行し、数々の御支援と御協力を頂きました、Daden Ramdan 氏、朝西誠氏(現 松下電工株式会社)、田中克昌氏(現 ソニー株式会社)、廣内智之氏、久國陽

介氏, 山本隆史氏に深く感謝致します.

最後に, 7年余りにも及ぶ神戸大学での学業ならびに研究活動に対してさしのべられた, 父 茂三と母 珠美の多大なる支援と理解に, 最大限の感謝と尊敬の意を表してここに記します.

2008 年 7 月 緑美しい六甲山の麓にて

山中晃徳