



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。



氏 名 山中 晃徳
博士の専攻分野の名称 博士（工学）
学 位 記 番 号 博い第 549 号
学位授与の要件 学位規則第 5 条第 1 項該当
学位授与の日付 平成 20 年 9 月 25 日

【 学位論文題目 】

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

審 査 委 員

主 査 教 授 富田 佳宏
教 授 中井 善一
教 授 保田 英洋
教 授 富山 明男

京都工芸繊維大学大学院工学研究科准教授 高木 知弘

(氏名：山中晃徳 NO. 1)

産業技術の発展に伴い、従来よりも高品質、高機能な鉄鋼材料の開発が求められており、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、従来の知識や経験のみでは理解することが困難な相変態挙動や微視組織形成が生じるようになり、力学特性の予測が困難になってきているのも事実である。そのため現在では、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。本論文では、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可能とするため、Phase-Field法による組織形成予測および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。さらに、一連の材質予測シミュレーションを行い、構築した材質予測手法の有効性や可能性を検討した。

第2章では、はじめにPhase-Field法の基本概念を述べ、Phase-Field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(α)変態などの拡散変態およびマルテンサイト変態を表現するPhase-Fieldモデルを構築した。さらに、鉄鋼材料の力学特性評価を行うために用いる均質化法に基づく有限要素法について述べ、有限要素方程式を導出した。

第3章では、鉄鋼材料の代表的な構成相である 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、 γ/α 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、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 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、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、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、AllotriomorphフェライトからWidmanstättenフェライトへの形態変化機構を明らかにした。

第4章では、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 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、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

(氏名：山中晃徳 NO. 2)

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を考慮することで、実験で観察されるようなパーライト組織のラメラの曲がりや θ 相の途切れが形成される過程を再現した。

第6章では、鉄鋼材料の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ことが明らかとなった。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、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再現可能とした。本Phase-Fieldモデルを用いることにより、初期炭素濃度や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、系統的に評価することができる。

第8章では、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を実施した。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は主に硬質なパーライト組織の体積分率に支配され、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ことを確認した。さらに、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により、高ひずみ領域の形成を抑制し、FP鋼の力学的特性を改善するための組織制御の指針を得ることができた。

以上のように、本研究で構築した系統的材質予測手法を用いることで、相変態組織の形成過程を理解し、予測できるだけでなく、各組織の形成メカニズムの解明や組織形成過程の支配因子の抽出も可能である。したがって、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し、要求される力学特性を顕現させるための組織制御方法や材料開発の指針を得ることができる。また、Phase-Field法を用いることで、凝固組織、再結晶組織の形成予測も可能である。よって、構築した材質予測シミュレーションをさらに発展させることで、実際の鉄鋼材料の製造プロセスにおける、全ての組織形成予測および力学特性評価を計算機内で一貫して実施可能になることを期待する。

氏名	山中 晃徳		
論文 題目	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		
審査委員	区分	職名	氏名
	主査教	授	富田佳宏
	副査教	授	中井善一
	副査教	授	保田英洋
	副査教	授	富山明男
	副査准	教授	高木知弘

要 旨

概要

産業技術の発展に伴い、鉄鋼材料の高品質、高機能化に対する強い要請に応えるべく、多種多様な鉄鋼材料が製造されている。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相変態や微視組織が発現し、最終製品の力学特性の予測が困難になってきている。そのため近年では、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。本論文では、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可能とするため、Phase-Field 法と均質化法を用いて組織形成予測および力学特性評価を可能とする、統一的材質予測シミュレーション法を構築し、本手法の有効性や可能性を検討している。

本論文第2章では、Phase-Field 法の基本概念を述べ、Phase-Field 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ている。ついで、フェライト変態などの拡散変態およびマルテンサイト変態を表現する Phase-Field モデルを構築し、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方程式を導出している。

第3章では、鉄鋼材料の代表的な構成相である 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、 α 相成長挙動および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ている。さらに、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 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、組織形態に及ぼす界面異方性の影響を検討するとともに、Widmanstätten フェライトの形態形成メカニズムを明らかにしている。

第4章では、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、冷却速度に依存した α 粒成長挙動を明らかにしている。さらに、相および結晶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、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ている。

第5章では、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い、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、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ることを示している。さらに、粒界拡散を Phase-Field モデルにおいて考慮することで、従来の解析結果よりも、実験で得られる成長速度に近いラメラ成長速度が得られること、 γ 相内の炭素濃度の不均一性を考慮することで、実験で観察されるようなパーライト組織のラメラの曲がりや θ 相の途切れが形成される過程を再現できることを示している。

第6章では、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 モデルを構築し、マルテンサイト組織の形成シミュレーションを行い、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している。さらに、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を再現し、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化の条件に特徴づけられ、自己緩和と塑性緩和のバランスに依存して変化することを示している。

第7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表現する統一的 Phase-Field モデルを提案し、2元合金の等温保持において、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生じる競合変態の数値シミュレーションを行い、初期炭素濃度や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、系統的に評価可能であることを示している。

第8章では、フェライト+パーライト(FP)鋼を解析対象とし、Phase-Field 法と均質化法による系統的な材質予測シミュレーションを実施し、FP 鋼の組織形成過程から巨視的な変形挙動および組織形態に依存した微視的な応力・ひずみ分布を評価可能となり、FP 鋼の力学的特性を改善するための組織制御の指針を得ることができると示している。

以上のように、本研究は、相変態組織の形成過程の理解ならびに予測に加えて、各組織の形成メカニズムの解明や組織形成過程の支配因子の抽出も可能とする統一的材質予測手法の構築と広範な相変態組織形成に関する研究の集積であり、材質予測シミュレーションを繰り返し実施することによって、実際の鉄鋼材料の製造プロセスにおいて、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材料開発に指針を与える適切な情報をもたらすことが期待できる。よって、学位申請者の山中晃徳は、博士(工学)の学位を得る資格があると認める。