

平成 28 年 5 月 18 日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2015

課題番号：26820282

研究課題名(和文) 材料ミクロ組織の違いを引き起こす支配因子の究明

研究課題名(英文) Dominant factors that cause the difference in material microstructure

研究代表者

塚田 祐貴 (Tsukada, Yuhki)

名古屋大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：00620733

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,200,000円

研究成果の概要(和文)：フェーズフィールド法に基づき、低炭素鋼におけるマルテンサイト組織形成過程をシミュレートしました。母相のすべりの有無によって、弾性ひずみエネルギー緩和プロセスが変化し、マルテンサイト組織の違いが生じることが分かりました。一方で、母相のすべりの有無は、マルテンサイト相の晶癖面形成に対してほとんど影響を及ぼさないことが明らかになりました。さらに、降伏応力の値がマルテンサイト組織に及ぼす影響をシミュレートした結果、降伏応力の値が500 MPa以上の条件において、降伏応力の値の増加とともにマルテンサイト組織が微細化する傾向があることが明らかになりました。

研究成果の概要(英文)：Martensitic transformation in low-carbon steels was simulated on the basis of the phase-field method. It was found that the presence of slip in the matrix phase changed the relaxation process of elastic strain energy and caused the difference in martensite microstructure. On the other hand, the presence of slip in the matrix phase had little effect on the formation of martensite habit plane. In addition, effect of the value of yield stress on the martensite microstructure was simulated by the phase-field method. It was found that when the value of yield stress was not lower than 500 MPa, the martensite microstructure became fine with increasing the value of yield stress.

研究分野：材料組織学

キーワード：フェーズフィールド法 鉄鋼材料 マルテンサイト変態 転位 弾性ひずみエネルギー

### 1. 研究開始当初の背景

近年、低炭素鋼におけるマルテンサイト組織について、複雑な階層構造を有していること、合金炭素量に依存して組織サイズが変化することなどが報告されています。マルテンサイト変態においては、形状変化によって生じる弾性ひずみエネルギーが、各相の塑性変形や複数のマルテンサイトバリエーション形成によって緩和されますが、その緩和プロセスがマイクロ組織形成と密接に関係すると考えられています。マルテンサイト組織を適切に制御するためには、組織形成機構を定量的に理解する必要があります。

### 2. 研究の目的

マイクロ組織シミュレーション手法としてフェーズフィールド法が知られています。この手法は、組織形成過程をシミュレートできることはもちろん、マイクロ組織の全自由エネルギーの観点から、材料組織形成の要因を定量的に理解することができます。本研究では、マルテンサイト変態における結晶構造変化、母相 ( $\gamma$ ) およびマルテンサイト相 ( $\alpha'$ ) のすべり (塑性変形) を考慮したフェーズフィールドモデルを構築し、低炭素鋼のマルテンサイト組織形成機構を明らかにすることを目的とします。

### 3. 研究の方法

組織を記述するフィールド変数として、 $\alpha'$  相の存在確率を表す秩序変数  $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ 、および、各相の転位の密度関数

$${}^{(i)}p_{\alpha'}^{(m)}(\mathbf{r}, t) = \left| {}^{(i)}\mathbf{b}_{\alpha'}^{(m)} \right| / D_{\alpha'}^{(m)}(\mathbf{r}, t)$$

$$p_{\gamma}^{(n)}(\mathbf{r}, t) = \left| \mathbf{b}_{\gamma}^{(n)} \right| / D_{\gamma}^{(n)}(\mathbf{r}, t)$$

を定義します。 $i = 1, 2, 3$ は立方晶→正方晶変態に起因する3つの正方晶バリエーションを区別しています。また、 $m$ と $n$ は、それぞれ $\alpha'$ 相と $\gamma$ 相のすべり系の番号を表しています。 $\mathbf{b}$ はバーガスベクトル、 $D$ は活動したすべり面間の平均間隔です。フィールド変数は位置 ( $\mathbf{r}$ ) と時間 ( $t$ ) の関数であり、その発展は、

$$\frac{\partial \varphi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L_{\varphi} \frac{\delta G}{\delta \varphi_i(\mathbf{r}, t)}$$

$$\frac{\partial {}^{(i)}p_{\alpha'}^{(m)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L_p \frac{\delta G}{\delta {}^{(i)}p_{\alpha'}^{(m)}(\mathbf{r}, t)}$$

$$\frac{\partial p_{\gamma}^{(n)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L_p \frac{\delta G}{\delta p_{\gamma}^{(n)}(\mathbf{r}, t)}$$

にて計算されます。 $L$ は緩和係数、 $G$ は全自由エネルギーを表します。 $G$ はフィールド変数の汎関数形式にて、

$$G = E_{el}$$

$$+ \int_{\mathbf{r}} \left[ \begin{aligned} & f_L + \frac{\kappa_{\varphi}}{2} \sum_{i=1}^3 (\nabla \varphi_i)^2 \\ & + \frac{\kappa_p}{2} \sum_n (\mathbf{n}_{\gamma}^{(n)} \times \nabla p_{\gamma}^{(n)})^2 \\ & + \frac{\kappa_p}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_m \left( {}^{(i)}\mathbf{n}_{\alpha'}^{(m)} \times \nabla {}^{(i)}p_{\alpha'}^{(m)} \right)^2 \end{aligned} \right] d\mathbf{r}$$

にて与えられます。 $f_L$ は化学的自由エネルギー密度、 $\kappa$ は勾配エネルギー係数、 $\mathbf{n}$ はすべり面の単位法線ベクトルです。 $E_{el}$ は弾性ひずみエネルギーであり、フェーズフィールド微視的弾性論に基づき、次式にて与えられます。

$$E_{el} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \int_{\mathbf{r}} \left[ \{ \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, t) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}, t) \} \{ \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}, t) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}, t) \} \right] d\mathbf{r}$$

$C$ は弾性定数、 $\varepsilon$ は全ひずみ、 $\varepsilon^0$ はeigenひずみです。 $\varepsilon^0$ は、フィールド変数を用いて

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{kl}^0 \\ & = \sum_{i=1}^3 \left\{ \varepsilon_{kl}^{(i)} \varphi_i \right. \\ & \quad \left. + \sum_m \frac{{}^{(i)}\mathbf{n}_{\alpha'}^{(m)} \otimes {}^{(i)}\mathbf{b}_{\alpha'}^{(m)} + {}^{(i)}\mathbf{b}_{\alpha'}^{(m)} \otimes {}^{(i)}\mathbf{n}_{\alpha'}^{(m)}}{2 |{}^{(i)}\mathbf{b}_{\alpha'}^{(m)}|} {}^{(i)}p_{\alpha'}^{(m)} \right\} \\ & \quad \left. + \sum_n \frac{\mathbf{n}_{\gamma}^{(n)} \otimes \mathbf{b}_{\gamma}^{(n)} + \mathbf{b}_{\gamma}^{(n)} \otimes \mathbf{n}_{\gamma}^{(n)}}{2 |\mathbf{b}_{\gamma}^{(n)}|} p_{\gamma}^{(n)} \right\} \end{aligned}$$

にて与えられます。 $\alpha'$ 相については $\{101\}\{\bar{1}11\}$ の4すべり系、 $\gamma$ 相については $\{111\}\{\bar{1}10\}$ の12すべり系を考慮しました。 $\text{Fe-0.1mass\%C}$ 合金を解析対象とし、温度は300 K、解析領域は $522 \times 522 \times 522 \text{ nm}^3$ に設定しました。

### 4. 研究成果

(1)  $\gamma$ 相のすべりが生じないと仮定し、 $\alpha'$ 相のすべりのみを考慮したシミュレーションを実施しました。図1にシミュレーション結果を示します。異なる色はそれぞれ $\alpha'$ 相の3バリエーション (V1~V3) に対応します。また、 $t'$ は数値解析における無次元時間を表しています。複数のバリエーションが出現して、いわゆるマルチバリエーション組織が形成する過程が再現されました。 $t' = 6$ における組織を図2に示します。 $\gamma$ 相の(111)面に $\alpha'$ 相の晶癖面が形成していることが確認できます。実際、低炭素鋼のマルテンサイトについて、 $\alpha'$ 相の晶癖面が $\gamma$ 相の $\{111\}$ 面近傍に生成するという実験報告があります。晶癖面形成に関して、実験結果と対応する計算結果が得られたと考えています。

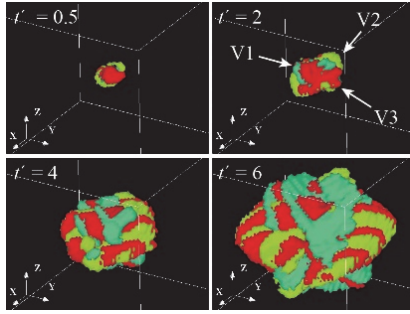


図1 マルテンサイト組織変化  
( $\gamma$ 相のすべり無し)

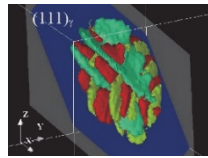


図2 マルテンサイト組織 ( $t' = 6$ )  
( $\gamma$ 相のすべり無し)

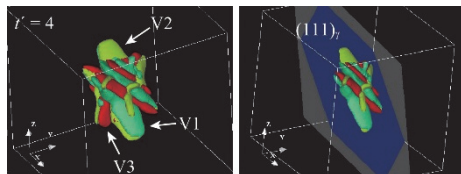


図3 マルテンサイト組織 ( $t' = 4$ )

(2)  $\gamma$ 相と $\alpha'$ 相の両相のすべりを考慮したシミュレーションを実施しました。(1)の結果と同様に、 $\alpha'$ 相の3バリエーションが出現して、マルチバリエーション組織が形成しました。 $t' = 4$ における組織を図3に示します。 $\gamma$ 相の(111)面に、 $\alpha'$ 相の晶癖面が形成していることが確認できます。シミュレーションでは、 $\alpha'$ 相が成長する際に、 $\gamma$ 相のすべり成分が $\alpha'$ 相中にそのまま引き継がれると仮定しています。したがって、 $\alpha'$ 相中には、「 $\alpha'$ 相のすべり」と「 $\alpha'$ 相へ引き継がれた $\gamma$ 相のすべり」の2つの成分が存在します。図4に $\alpha'$ 相中のすべり成分を示します。 $t' = 0 \sim 20$ のデータに着目すると、2つのすべり成分の割合がほぼ等しいことが分かります。この結果は、 $\gamma$ 相のすべりが、マルテンサイト変態における弾性ひずみエネルギー緩和において重要な役割を果たしていることを示唆しています。図1と図3を比較すると、 $\gamma$ 相のすべりの有無によって、マルテンサイト組織形態に違いが現れていることが確認できます。これは、 $\gamma$ 相のすべりの有無によって、弾性ひずみエネルギー緩和プロセスが変化したためと考えられます。一方、図1と図3において $\alpha'$ 相の(111)晶癖面の形成が確認できることから、 $\gamma$ 相のすべりの有無は、晶癖面形成に対してほとんど影響を及ぼさないことが明らかになりました。

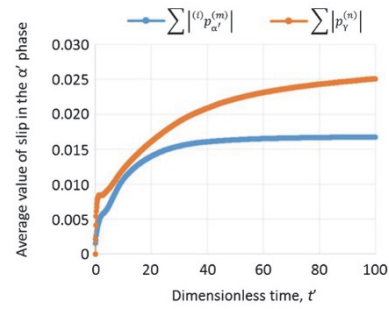


図4  $\alpha'$ 相中のすべり成分

(3) (2)のシミュレーションにおいて、 $t' = 0.4$ および $t' = 1.3$ におけるマルテンサイト組織を図5に示します。 $\alpha'$ 相のV1~V3のバリエーションが出現して、マルチバリエーション組織を形成していますが、 $t' = 1.3$ の白丸で示した箇所に、 $t' = 0.4$ の時には無かったV2の $\alpha'$ 相が生成していることが確認できます。この新たな $\alpha'$ 相の生成について、弾性相互作用エネルギーの観点から理解を試みました。弾性相互作用エネルギーとは、材料組織において応力場を作る原因Iと原因IIが共存することで生じるエネルギーであり、次式にて与えられます。

$$E_{\text{int}} = - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{kl}^I \varepsilon_{kl}^{0(\text{II})} d\mathbf{r}$$

$\sigma^I$ は原因Iによって作られる弾性応力、 $\varepsilon^{0(\text{II})}$ は原因IIを作るeigenひずみです。バリエーション*i*の $\alpha'$ 相が新たに生成するとき、生成する $\alpha'$ 相(変態ひずみ $\varepsilon^{(i)}$ )と既存の組織の間の弾性相互作用エネルギーは

$$\Delta E_{\text{int}}^{(i)} = -\sigma_{kl}(\mathbf{r}, t) \varepsilon_{kl}^{(i)}$$

だけ変化します。このとき、 $\Delta E_{\text{int}} < 0$ の領域が $\alpha'$ 相の優先生成サイトになります。 $t' = 0.4$ において $\Delta E_{\text{int}} \leq -600 \text{ J/mol}$ の領域を図6に示します(白色部分)。図6において黄丸で示した箇所が、図5においてV2の $\alpha'$ 相が新たに生成した箇所に対応します。この結果から、新たな $\alpha'$ 相生成には $-600 \text{ J/mol}$ 程度の弾性相互作用エネルギー変化が関与していることが明らかになりました。ただし、「弾性相互作用エネルギー変化が $-600 \text{ J/mol}$ より小さい」ことは、「新たな $\alpha'$ 相が生成する」ことの必要条件であって、十分条件にはなっていないことに注意する必要があります。

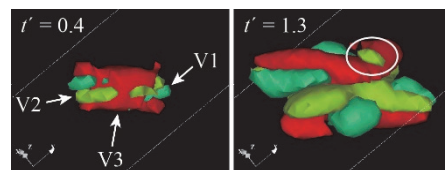


図5 マルテンサイト組織変化

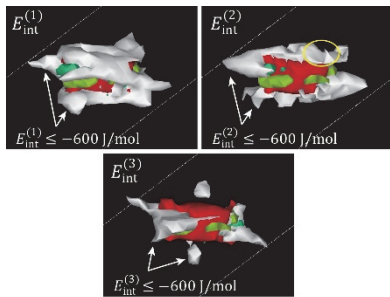


図 6 新たな $\alpha$ 相の生成による弾性相互作用エネルギー変化が負に大きい領域

(4) 各相のすべりの計算において降伏条件を考慮したシミュレーションを実施しました。数値解析においては、Mises 降伏条件を満たした領域においてのみ、フィールド変数 $p$ の発展を計算しました。降伏応力の値を 0~3000 MPa に設定して、降伏応力の値がマルテンサイト組織に及ぼす影響を調査しました。(2)と(3)のシミュレーションは、降伏応力が 0 MPa の場合に対応します。)降伏応力の値がいずれの条件の場合も、 $\alpha'$ 相の V1~V3 のバリエーションが出現し、マルチバリエーション組織が形成しました。また、いずれの条件の場合も、 $\alpha'$ 相の(111)晶癖面が形成しました。一方、降伏応力の値の増加とともに、各相のすべり量が減少しました。降伏応力の値が 0~500 MPa の範囲においては、組織のサイズに有意差はありませんでした。しかし、降伏応力の値が 500 MPa 以上の条件では、降伏応力の値の増加とともに、マルチバリエーション組織が微細化する傾向が確認されました。これは、各相のすべり量の減少により、塑性変形による弾性ひずみエネルギー緩和量が小さくなり、マルチバリエーション形成による弾性ひずみエネルギー緩和量が増加したためと推察されます。今後、マルチバリエーション組織のサイズを定量化し、降伏応力が組織サイズに及ぼす影響を定量的に明らかにする必要がありますと考えられます。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① Yuhki Tsukada, Yasuhiro Kojima, Toshiyuki Koyama, Yoshinori Murata, Phase-field simulation of habit plane formation during martensitic transformation in low-carbon steels, ISIJ International, 査読有, Vol. 55 (2015) pp. 2455-2462. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2015-039>
- ② 塚田祐貴, 小山敏幸, 村田純教, 低炭素鋼におけるマルテンサイト組織形態形成と転位すべりの相関, 日本学術振興会合金状態図第 172 委員会研究報告書, 査読無, Vol. 14 (2014) pp. 48-57.

[学会発表] (計 7 件)

- ① 塚田祐貴, 小山敏幸, 村田純教, 原田拓弥, マルテンサイト変態におけるすべりと組織形成のフェーズフィールドシミュレーション, 日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会, 2016 年 3 月 24 日, 東京理科大学 (東京都) .
- ② 塚田祐貴, 小山敏幸, 原田拓弥, 村田純教, マルテンサイト組織形成に及ぼす弾性相互作用エネルギー場の影響, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会, 2015 年 10 月 10 日, 横浜国立大学 (横浜市) .
- ③ 原田拓弥, 塚田祐貴, 小山敏幸, 村田純教, 鋼のマルテンサイト変態におけるバリエーション形成に及ぼす弾性相互作用の影響, 日本鉄鋼協会第 170 回秋季講演大会, 2015 年 9 月 17 日, 九州大学 (福岡市) .
- ④ Y. Tsukada, T. Koyama, Y. Murata, A phase-field simulation study on the correlation between dislocation and habit plane formation during martensitic transformation, International Conference on Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials 2015, 2015 年 6 月 30 日, Whistler (Canada).
- ⑤ 原田拓弥, 塚田祐貴, 小山敏幸, 村田純教, 鋼のマルテンサイト相生成に及ぼす転位すべりの影響, 日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会, 2014 年 9 月 25 日, 名古屋大学 (名古屋市) .
- ⑥ Y. Tsukada, T. Koyama, Y. Murata, A simulation study on the formation of habit plane of martensite phase in low-carbon steels, Third International Symposium on Phase-field Method 2014, 2014 年 8 月 27 日, State College (USA).
- ⑦ Y. Tsukada, T. Koyama, A simulation study of the effect of dislocation slip on the morphology of martensite phase, International Conference on Martensitic Transformations 2014, 2014 年 7 月 8 日, Bilbao (Spain).

[その他]

ホームページ

<http://www.numse.nagoya-u.ac.jp/PFM/>

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

塚田 祐貴 (TSUKADA, Yuhki)

名古屋大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 00620733