

平成21年 6月 5日現在

研究種目：若手研究(B)  
 研究期間：2007～2008  
 課題番号：19760068  
 研究課題名（和文） 材料の組織予測と強度評価のためのマルチスケール・フェーズフィールドモデルの構築  
 研究課題名（英文） Development of Multi-Scale Phase-Field Model to Evaluate Material Microstructure and Mechanical Behavior  
 研究代表者  
 高木 知弘 (TAKAKI TOMOHIRO)  
 京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・准教授  
 研究者番号：50294260

研究成果の概要：本研究では、材料の組織予測とその組織を有する材料のマクロな強度評価を同時にもしくは連続的に評価可能なマルチスケールモデルの構築を目標とし、フェーズフィールド法単体もしくはフェーズフィールド法と有限要素法を同時に用いる材料特性予測数値モデルを構築し、再結晶や相変態などの微視組織予測と力学挙動予測のシミュレーションを可能とした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	800,000	0	800,000
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,900,000	330,000	2,230,000

研究分野：計算力学・材料力学・結晶成長・相変態

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：(1) フェーズフィールド法 (2) マルチスケール解析 (3) 材料加工・処理  
(4) 材料組織設計 (5) シミュレーション工学

## 1. 研究開始当初の背景

材料の強度に代表される様々な機能は、材料が製品となるまでに経験する様々な加工プロセスにおいて生成される微視組織の影響を強く受ける。今後開発される機械やデバイスの高機能化のため、材料に要求される性能は益々厳しくなることが容易に想像され、材料微視組織の制御創成による材料の高機能化、および材料新機能の発現が不可欠であり、これは材料組織形成およびこの組織に基づいた材料応答を表現可能な適切な数値モデルおよび数値シミュレーション手法の構

築により可能になる。

材料強度の組織依存性を表す Hall-Petch の関係（結晶粒が小さくなると材料の強度が増加する現象）は、材料強度の指針となる極めて重要な特性であり、結晶塑性論や分子動力学法などによる異なったスケールからのメカニズムの解明および現象を再現するモデルの構築が試みられている。しかしながら、空間と時間スケールの観点から分子動力学法では今日の計算機を持ってしても評価は困難であり、結晶塑性論に関しても幾つかの結果を除いて粒サイズの初期降伏応力依存

性などは再現されていない。さらに、これらの評価は初期の材料組織を仮定したものであり、複数の材料加工プロセスを横断した評価は不可能である。

材料組織評価の強力なツールとして、フェーズフィールド法が注目されている。フェーズフィールド法は、物理学や金属学の分野から発展してきた手法であり、ここ最近になって機械の分野でも注目され始めている。このフェーズフィールド法により、もしくはフェーズフィールド法を他の手法と同時に用いることで、これまで成し得なかった組織形成と強度評価の連続的なもしくは同時の評価が可能となることが期待される。

## 2. 研究の目的

本研究では、材料の組織形成と組織に依存した強度評価を可能とするマルチスケール・フェーズフィールドモデルの構築およびこのモデルを用いた数値シミュレーション手法の確立を行うことを目的としている。また、本手法を用いることで、材料組織形成過程のメカニズムの解明および組織に依存した強度評価シミュレーションを行う。

## 3. 研究の方法

本研究は大きく2つの方法を並行して行うことでなされた。

一つは、フェーズフィールド法のみで材料微視組織発展予測と組織に依存した力学予測を同時に行おうとする試みである。ここで、分子動力学法と同じ空間スケールを対象としながら、拡散時間スケールでの評価を可能とするフェーズフィールド・クリスタル法を金属材料特性予測シミュレーション手法として採用し、組織発展と強度評価の同時評価を可能とする。

もう一つは、従来のフェーズフィールド法により静的再結晶、動的再結晶、相変態など、様々な現象で形成される材料組織を予測するモデルを構築し、そこでシミュレートされた組織を有する材料の強度評価を有限要素法により行おうとするものである。

## 4. 研究成果

3の研究方法で述べたように、複数の数値モデルを用いて、様々な現象を評価可能なモデルの構築を行った。以下に、個々の結果を示す。

### フェーズフィールド・クリスタル法

分子動力学法と同程度の空間スケールを対象とし、拡散時間スケールにおける材料評価を可能とするフェーズフィールド・クリスタル法によりナノ多結晶体の塑性変形シミュレーションを可能とする数値シミュレーション手法の構築を行った。ここで、差分格

子のアスペクト比を変形と伴に変化させる手法を採用し、塑性変形過程の体積一定アフィン変形を可能とした。本手法を用いて、1次元、2次元2結晶、2次元多結晶体の変形シミュレーションを行い、構築した手法が材料の変形シミュレーション手法として有用であることを結論付けた。図1は構築した手法によるナノ多結晶体の変形シミュレーション結果の一例である。高温条件でのシミュレーションであるため、粒界移動など粒間変形が主な変形素過程となっていることを確認することができた。

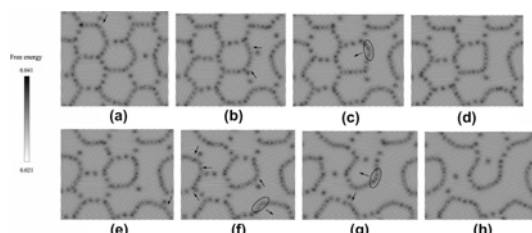


図1 フェーズフィールド・クリスタル法によるナノ多結晶体の変形シミュレーション

### 静的再結晶フェーズフィールドモデル

金属材料を塑性変形させ引続いて再結晶温度以上の温度で焼きなますと、転位をほとんど含まない粒が核生成し成長する静的再結晶が生じる。本研究では、塑性変形を結晶塑性有限要素法により評価し、そこで得られる変形組織を初期条件とし、フェーズフィールド法により再結晶粒の核生成と成長を表現する、結晶塑性有限要素法とフェーズフィールド法を連成した静的再結晶シミュレーションモデルの構築を行った。ここで、転位の弾性エネルギーである蓄積エネルギーを駆動力とする再結晶モデルと、結晶塑性有限要素法の結果から変形サブグレイン組織を予測し、粒界エネルギーのバランスで再結晶を表現する再結晶モデルを提案した。図2は後者の手法を用いた場合の再結晶組織発展の一例である。結晶塑性有限要素法の結果を用いることで、塑性変形の不均一性を考慮した再結晶シミュレーションを可能としており、今後、再結晶集合組織予測などへの適用が期待される。

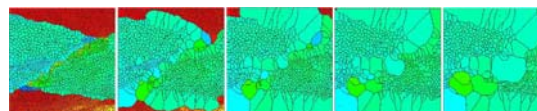


図2 結晶塑性有限要素法の結果から予測されたサブグレイン組織からの再結晶組織発展シミュレーション

### 動的再結晶フェーズフィールドモデル

積層欠陥エネルギーの比較的低い金属材料を熱間で加工すると、変形による転位の蓄積と同時に、再結晶粒の生成と成長を伴う動

動的再結晶が生じる。この場合、マクロな力学挙動は再結晶組織に強く影響を受けるため、微視組織の発展に起因するマクロな力学応答を評価可能なマルチスケール手法の構築が必要である。本研究では、マルチフェーズフィールド法を用いることで、動的再結晶の組織発展とそれに依存する力学挙動を評価可能なMPF-DRXモデルの構築を行った。

図3は再結晶粒の生成と成長のシミュレーション例を示している。マルチフェーズフィールド法を用いることで、結晶方位の異なる再結晶粒の生成と成長を再現できていることが分かる。

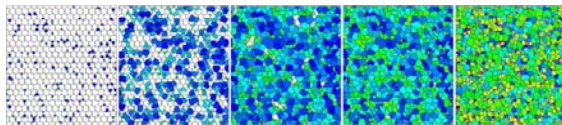


図3 動的再結晶シミュレーションにおける微視組織の時間発展

図4は、様々な初期粒サイズに対してシミュレーションを行った際のマクロな応力-ひずみ関係と平均粒サイズの変化を示している。このように、微視組織発展に依存したマクロな力学的挙動をシミュレートすることに成功した。

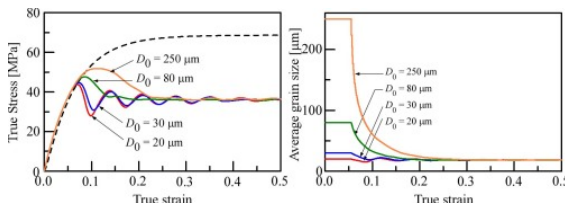


図4 粒サイズに依存したマクロな応力-ひずみ関係と平均粒サイズ変化

#### Fe-C合金の微視組織設計ツールの構築

Fe-C合金は工業材料の中で最も重要な材料といえる。この材料の更なる高強度化のための微視組織設計手法の構築が必要である。本研究では、以前構築したFe-C合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態を再現可能とするフェーズフィールドモデルを用いて組織予測を行い、その組織を有する材料の力学的挙動を均質化法によって評価する、フェーズフィールド法と均質化法を連成した材料組織設計手法の構築を行った。

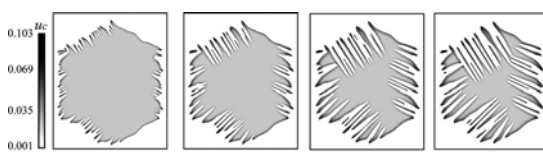


図5 粒界からのウィッドマンステッテンフェライトの成長フェーズフィールドシミュレーション

図5はオーステナイト多結晶を想定し、その1つの粒内における粒界からのフェライトプレート成長過程をフェーズフィールド法によりシミュレートした結果である。このように得られる材料組織から代表体積要素を作成し、均質化法を用いた有限要素法により強度評価を行った結果を図6に示している。このように任意の熱処理条件における任意の時間において形成される微視組織に対する材料内部の応力分布とマクロな応力-ひずみ関係の評価を可能とした。

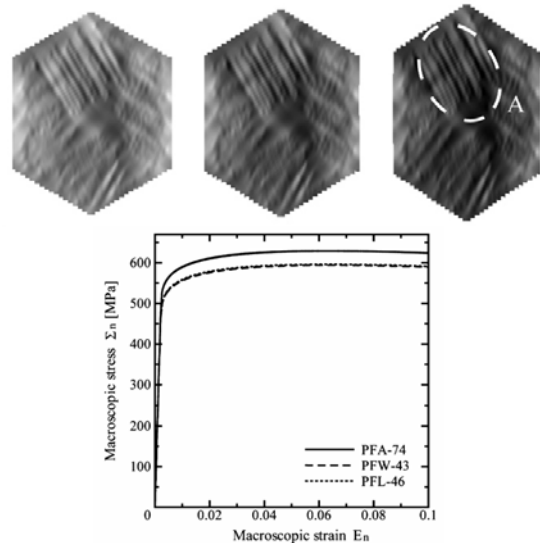


図6 均質化法を用いた有限要素法による材料内の相当応力変化とマクロな応力-ひずみ関係

以上のように、本研究ではフェーズフィールド法単独により材料組織と材料強度を評価可能とするマルチスケールモデルの構築と、フェーズフィールド法と有限要素法を連成させることで、組織予測と強度評価を可能とする手法の構築を行った。

今後、これらの手法をより現実的な材料に適用し、実験結果等と比較することでその有用性・実用性を高めることが必要であると考えている。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計14件)

- ① T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation, Computational Materials Science, Vol.44, 1192-1197, (2009),

- 査読有.
- ② 廣内智之, 高木知弘, 富田佳宏, Phase Field Crystal法による材料変形シミュレーション, 日本機械学会論文集 A編, 74 巻 747 号, 1441-1446, (2008), 査読有.
- ③ R. D. Ramdan, T. Takaki, Y. Tomita, Free Energy Problem for the Simulations of the Growth of Fe<sub>2</sub>B Phase Using Phase-Field Method, Materials Transactions, Vol. 49, 2625-2631, (2008), 査読有.
- ④ T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, Multi-Phase-Field Model to Simulate Microstructure Evolutions during Dynamic Recrystallization, Materials Transactions, Vol. 49, 2559-2565, (2008), 査読有.
- ⑤ A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Elastoplastic phase-field simulation of self- and plastic accommodations in Cubic → tetragonal martensitic transformation, Materials Science and Engineering: A, Vol. 491, 378-384, (2008), 査読有.
- ⑥ A. Yamanaka, T. Takaki, 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, Vol. 480, 244-252, (2008), 査読有.
- ⑦ T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Tomita, Phase-field study of interface energy effect on quantum dot morphology, Journal of Crystal Growth, Vol. 310, 2248-2253, (2008), 査読有.
- ⑧ A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Multi-phase-field modeling of diffusive solid phase transition in carbon steel during continuous cooling transformation, Journal of Crystal Growth, Vol. 310, 1337-1342, (2008), 査読有.
- ⑨ T. Takaki, Y. Yamanaka, Y. Higa, Y. Tomita, Phase-Field Model during Static Recrystallization based on Crystal-Plasticity Theory, Journal of Computer-Aided Materials Design, Vol. 14, 75-84, (2007), 査読有.
- ⑩ T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-Field Modeling and Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grains, Materials Science Forum, Vols. 558-559, 1195-1200, (2007), 査読有.
- ⑪ T. Takaki, M. Asanishi, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-Field Simulation During Spherulite Formation of Polymer, Key Engineering Materials, Vols. 345-346, 939-942, (2007), 査読有.
- ⑫ A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Phase-field Modeling of Morphological Change of Ferrite during Decomposition of Austenite in Fe-C Alloy, Key Engineering Materials, Vols. 345-346, 935-938, (2007), 査読有.
- ⑬ 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, 第 73 巻 728 号, 482-489, (2007), 査読有.
- ⑭ T. Takaki, Y. Tomita, Phase-Field Simulation of Surface Morphology Evolution during Epitaxial Growth of SiGe/Si System, Key Engineering Materials, Vols. 340-341, 1073-1078, (2007), 査読有.
- [学会発表] (計 43 件)
- ① 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field法と結晶塑性論による再結晶組織予測の高精度化の検討, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008/11/1-3. (琉球大学)
- ② 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏, 弾塑性 Phase-Fieldモデルによる相変態シミュレーション, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008/11/1-3. (琉球大学)
- ③ 廣内智之, 高木知弘, 富田佳宏, Phase Field Crystal変形シミュレーションによる温度・粒径依存性の特性評価, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008/11/1-3. (琉球大学)
- ④ 久國 陽介, 高木知弘, 富田佳宏, Multi-Phase-Fieldシミュレーションによる動的再結晶の特性評価, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008/11/1-3. (琉球大学)
- ⑤ 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組織の形成予測, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008/11/1-3. (琉球大学)
- ⑥ 高木知弘, 富田佳宏, MPF-DRXモデルによる熱間加工過程の微視組織発展と力学的特性予測, 第 52 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2008/10/22-23. (京大会館)
- ⑦ 高木知弘, Phase-field法による再結晶組織予測, 第 52 回日本学術会議材料工

- 学連合講演会：富田記念シンポジウム，2008/10/24. (京大会館)
- ⑧ 山中晃徳，高木知弘，富田佳宏，Phase-Field法による鉄鋼材料の材質予測，第52回日本学術会議材料工学連合講演会：富田記念シンポジウム，2008/10/24. (京大会館)
- ⑨ 廣内智之，高木知弘，富田佳宏，Phase Field Crystal法による変形シミュレーション，第52回日本学術会議材料工学連合講演会：富田記念シンポジウム，2008/10/24. (京大会館)
- ⑩ 高木知弘，廣内智之，富田佳宏，Phase-Field-Crystal法の基本特性評価，M&M2008 材料力学カンファレンス，2008/9/16-18. (立命館大学)
- ⑪ 山中晃徳，高木知弘，富田佳宏，Multi-Phase-Field法と均質化法による鉄鋼材料の力学特性予測，M&M2008 材料力学カンファレンス，2008/9/16-18. (立命館大学)
- ⑫ 廣内智之，高木知弘，富田佳宏，Phase Field Crystal 法によるナノ結晶体の変形特性解析，M&M2008 材料力学カンファレンス，2008/9/16-18. (立命館大学)
- ⑬ 山本隆史，山中晃徳，高木知弘，富田佳宏，パーライト組織形成過程のMulti-Phase-Fieldシミュレーション，M&M2008 材料力学カンファレンス，2008/9/16-18. (立命館大学)
- ⑭ 久國陽介，高木知弘，富田佳宏，Phase-fieldシミュレーションによる動的再結晶過程の粒径依存性の検討，M&M2008 材料力学カンファレンス，2008/9/16-18. (立命館大学)
- ⑮ 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，日本材料学会第57期学術講演会，2008/5/24-25. (鹿児島大学)
- ⑯ 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，日本材料学会第57期学術講演会，2008/5/24-25. (鹿児島大学)
- ⑰ 廣内智之，高木知弘，富田佳宏，ナノ結晶材料変形過程のPhase Field Crystalシミュレーション，日本材料学会第57期学術講演会，2008/5/24-25. (鹿児島大学)
- ⑱ 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，日本材料学会第57期学術講演会，2008/5/24-25. (鹿児島大学)
- ⑲ 高木知弘，久國陽介，富田佳宏，Multi-phase-field法による動的再結晶のモデリングとシミュレーション，日本材料学会第13回分子動力学シンポジウム，2008/5/23. (鹿児島大学)
- ⑳ 廣内智之，高木知弘，富田佳宏，Phase Field Crystal法による材料変形シミュレーション手法の構築，日本材料学会第13回分子動力学シンポジウム，2008/5/23. (鹿児島大学)
- 21 T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Static Recrystallization Phase-Field Simulation based on the Predicted Subgrain Structures, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics, 2007/12/3-6, Kyoto, JAPAN.
- 22 Y. Hisakuni, T. Takaki, Y. Tomita, Phase-Field Simulations during Dynamic Recrystallization, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics, 2007/12/3-6, Kyoto, JAPAN.
- 23 T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, Phase Field Crystal Simulations during Plastic Deformation of Nanopolycrystalline Metal, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics, 2007/12/3-6, Kyoto, JAPAN.
- 24 A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Elastoplastic Phase-Field Model of Martensitic Transformation, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics, 2007/12/3-6, Kyoto, JAPAN.,
- 25 R. D. Ramdan, T. Takaki, Y. Tomita, Development of Phase-Field Model of Boronizing Process on Technically Pure (TP) Iron Steels, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics, 2007/12/3-6, Kyoto, JAPAN.
- 26 T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Tomita, Phase-field study of interface energy effect on quantum dot morphology, The 15th International Conference on Crystal Growth, 2007/8/12-17, Salt Lake City, USA.
- 27 A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Multi-Phase-Field Modeling of Diffusive Solid Phase Transition in Carbon Steel during Continuous Cooling Transformation, The 15th International Conference on Crystal Growth, 2007/8/12-17, Salt Lake City, USA.
- 28 T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-Field Modeling for Dynamic

- Recrystallization, International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and their applications, 2007/8/6-10, Montreal, Canada.
- 29 A. Yamanaka, T. Takaki, Y. 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, 2007/8/6-10, Montreal, Canada.
- 30 K. Tanaka, T. Takaki, Y. Tomita, 2D Phase-Field Simulation of Static Recrystallization, International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and their applications, 2007/8/6-10, Montreal, Canada.
- 31 M. Asanishi, T. Takaki, Y. Tomita, Polymer Spherulite Growth Simulation during Crystallization by Phase-Field Method, International Conference on Advances and Trends of Engineering Materials and their applications, 2007/8/6-10, Montreal, Canada.
- 32 T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-Field Modeling and Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grains, The 3rd International Conference on Recrystallization and Grain Growth, 2007/6/10-15, Jeju island, Korea.
- 33 T. Takaki, M. Asanishi, A. Yamanaka, Y. Tomita, Phase-field simulation during spherulite formation of polymer, 10th International Conference on The Mechanical Behavior of Materials, 2007/5/27-31, Busan, Korea.
- 34 A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Phase-field modeling of morphological change of ferrite during decomposition of austenite in Fe-C alloy, 10th International Conference on The Mechanical Behavior of Materials, 2007/5/27-31, Busan, Korea.
- 35 高木知弘, 田中克昌, 富田佳宏, KWC Phase-fieldモデルの再結晶問題への適用可能性の検討, 第20回計算力学講演会, 2007/11/26-28. (同志社大学)
- 36 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, 第20回計算力学講演会, 2007/11/26-28. (同志社大学)
- 37 廣内智之, 高木知弘, 富田佳宏, Phase Field Crystal法によるナノ多結晶体の変形特性解析, 第20回計算力学講演会, 2007/11/26-28. (同志社大学)
- 38 久國陽介, 高木知弘, 富田佳宏, 動的再結晶過程のPhase-Fieldシミュレーション, 第20回計算力学講演会, 2007/11/26-28. (同志社大学)
- 39 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16回ヤングサイエンティストフォーラム「計算機支援による材料設計とその手法-II」, 2007/9/19-21. (岐阜大)
- 40 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field法による自己形成量子ドット形態におよぼす界面エネルギーの影響評価, 日本機械学会 2007年度年次大会, 2007/9/9-12. (関西大学)
- 41 田中克昌, 高木知弘, 富田佳宏, Phase-field法による変形組織にもとづく再結晶組織予測, 日本機械学会 2007年度年次大会, 2007/9/9-12. (関西大学)
- 42 朝西誠, 高木知弘, 富田佳宏, ポリマーの球晶形成Phase-fieldシミュレーション, 日本機械学会 2007年度年次大会, 2007/9/9-12. (関西大学)
- 43 廣内智之, 高木知弘, 富田佳宏, 多結晶体の形成過程と変形過程のPhase Field Crystalシミュレーション, 日本機械学会 2007年度年次大会, 2007/9/9-12. (関西大学)

[その他]

ホームページ等

<http://www.cis.kit.ac.jp/~takaki/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

高木 知弘 (TAKAKI TOMOHIRO)

京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・  
准教授

研究者番号：50294260

### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：