

# 組織シミュレーション技術の最近の進歩

## はじめに

金属材料分野でのCAE (Computer Aided Engineering) と言えば、加工やプレス成形中の応力・変形解析、あるいは溶接プロセスなどにおける温度分布・残留応力解析、流体解析などの計算機シミュレーションがイメージされます。これらの計算はプロセスの最適化などに大いに役立っています。一方、金属材料組織に関わる計算機シミュレーション技術も近年著しく進歩しています。

CALPHAD法<sup>1)</sup>による多元系合金の平衡状態図計算に加え、材料組織の時間発展をトレースし可視化するシミュレーション手法も開発されています。そのうちの一つが1990年代より発展してきたマルチフェーズフィールド法<sup>2)</sup>と呼ばれる手法で、材料開発の有効な手段となりつつあります。

本稿では、最近の組織シミュレーション技術の適用例として、純チタン板の結晶粒径予測を目的とした結晶粒成長シミュレーションの結果<sup>3)</sup>をマルチフェーズフィールド法の概要とともに紹介します。

## 平衡状態図計算からマルチフェーズフィールド法組織シミュレーションへ

図1は、CALPHAD法で計算したTi-Fe二元系の計算平衡状態図<sup>4)</sup>です。強度を上げる酸素とともに添加されるFeは、高温相であるβ相安定化元素なので、α+β二相領域を拡大します。少量のβ相がα相の粒成長に影響を与えることが考えられ、α粒径予測のためにはβ相を考慮した組織シミュレーションが必要となります。マルチフェーズフィールド法では、各結晶粒あるいは析出物にフェーズフィールド $\phi_p$ が設定されます。結晶粒pの位置では $\phi_p=1$ 、それ以外では $\phi_p=0$ 、粒界では $0<\phi_p<1$ となります。フェーズフィールド $\phi_p$ の時間変化 $\partial\phi_p/\partial t$ を記述する方程式がマルチフェーズフィールド方程式です。以下の式(1)であらわされます<sup>5)</sup>。

式の右辺には、界面エネルギー $\sigma_{pq}$ 、界面

$$\frac{\partial\phi_p}{\partial t} = \sum_{q=1}^v M_{pq} \left[ \sigma_{pq} \left( \phi_q \nabla^2 \phi_p - \phi_p \nabla^2 \phi_q + \frac{\pi^2}{2\eta^2} (\phi_p - \phi_q) \right) + \frac{\pi}{\eta} \sqrt{\phi_p \phi_q} \Delta g_{pq} \right] \dots \dots \text{式(1)}$$

表1 供試材の化学組成 (mass%)

試料	Fe	O	Ti	β相体積率
A材	0.03	0.05	Bal.	0%(800°C)
B材	0.07	0.07	Bal.	1%(800°C)

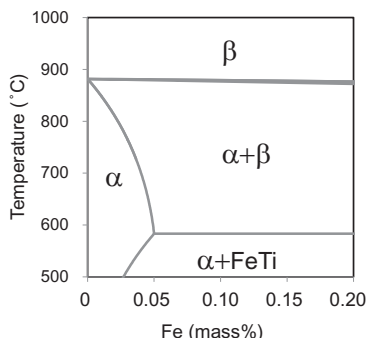


図1 Ti-Fe二元系の計算平衡状態図 (OpenCALPHAD)

易動度 $M_{pq}$ などの物性値と、CALPHAD法と連立させて計算する相変態の熱力学的駆動力 $\Delta g_{pq}$ が含まれています。

界面易動度は、しばしば実験結果とのあわせのためのフィッティングパラメーターとして扱われます。さらに、この式には結晶粒成長の駆動力である結晶粒界面の曲率による張力が含まれており、相変態と結晶粒成長を同時に扱えます。多成分系の場合、フェーズフィールド方程式に溶質元素の拡散方程式を連立させます。計算結果は二次元あるいは三次元の組織の可視化像として出力されます。

## 純チタン薄板におけるα結晶粒成長シミュレーション

熱交換器や航空機、建材といった幅広い産業分野で使用されている工業用純度の純チタン薄板においても、鉄鋼材料などと同様に、その機械的性能は結晶粒径に大きく影響されます。したがって、シミュレーションによる結晶粒径予測手法の確立は重要です。ここでは、表1に示す二種類の材料を用いて行った粒径予測組織シミュレーションを例に、必要なパラメーターを基礎的な実験から得て、粒径予測シミュレーションを行う手順とその結果を述べます。

実験では、熱延後、α単相域での固溶化熱処理を経て冷間加工した板に、800°Cで600sまでの最終熱処理を施して結晶粒を成長させ粒径を測定しました。800°CではA材はほぼα単相、B材はα+β二相であることが状態図(図1)からわかります。シミュレーションはTi-Fe-O三元系として行い、界面エネルギーとFe、酸素の拡散係数は文献値を用いました。計算領域は400μm×400μmとしました。A材について粒成長実験での平均粒径の時間変化と一致するように界面易動度を変えたシミュレーションを繰り返して、α粒界の界面易動度の値として $M=6 \times 10^{-12} \text{ m}^4/\text{Js}$ を得ました(図2)。その時のA材のシミュレーション組織とマイクロ組織写真

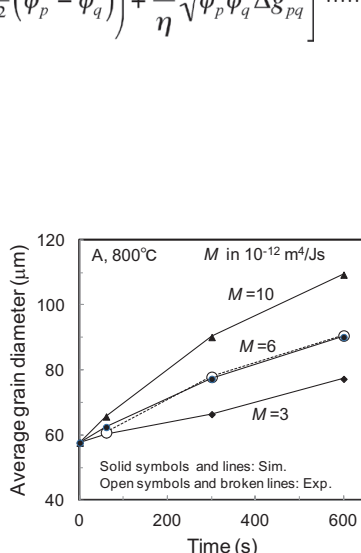


図2 平均粒径に及ぼす界面易動度の影響 (A材)

の比較を図3に示します。シミュレーションが実際の組織をよく再現しているのがわかります。次に、A材で得た界面易動度を用いて、α+β二相のB材のシミュレーションを行いました。β相の体積率はCALPHAD計算の結果を用い1%とし、β相の初期配列はマイクロ写真を参考に決めました。B材のシミュレーション組織とマイクロ写真を図4に示します。図中の黒い点がβ相です。こちらでもシミュレーションが実際の組織をよく再現しているのがわかります。さらに図3と比較すると、B材の粒径は、A材のそれに比較して小さいことがわかります。すなわち、B材ではβ相の存在によりα相の結晶粒成長が抑制されています。β相によるピン止め効果が働いていることを示しています。

## おわりに

以上、弊社が取り組んでいるマルチフェーズフィールド法を用いた材料組織シミュレーション技術を、純チタン板の結晶粒成長シミュレーションを例として紹介しました。

## お問い合わせ先

富津事業所 構造力学ソリューション部 (尼崎駐在)

関 彰

TEL 06-7670-4166

FAX 06-6489-5799

E-mail: seki-akira@nsst.jp

## <参考文献>

- 1) 阿部太一: カルファド法による状態図計算, 東京, 内田老鶴圃(2015).
- 2) 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法, 東京, 養賢堂(2012).
- 3) 関 彰, 澤田正美, 森口晃治, 白井善久: 新日鐵住金技報, 396, 43-49(2013).
- 4) OpenCALPHAD: <http://www.opencalphad.com>
- 5) J. Eiken, B. Böttger, I. Steinbach: Phys. Rev. E, 73, 066122 (2006).

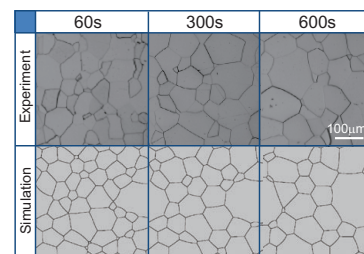


図3 A材の800°Cでの組織の時間発展

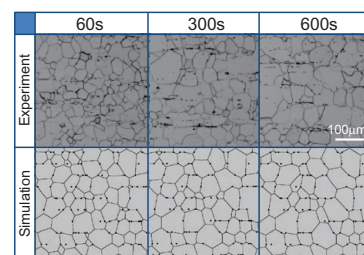


図4 B材の800°Cでの組織の時間発展