



私の論文

／ 今振り返ってみて、行間にこめた思い、エピソード

マルテンサイト変態における すべり変形と晶癖面形成

Slip Deformation and Habit Plane Formation during Martensitic Transformation

塚田祐貴

Yuhki Tsukada

名古屋大学 大学院工学研究科

材料デザイン工学専攻

准教授

1 はじめに

この度、「私の論文」に寄稿させていただく機会を頂戴した。本稿で紹介する論文¹⁾は、低炭素鋼のマルテンサイト変態のフェーズフィールドシミュレーションに関するものである。特に、マルテンサイト変態におけるすべり変形と晶癖面形成の関心に焦点を当てた論文である。本稿ではまず、この研究に取り組むことになった動機について述べる。また、晶癖面形成に重要な役割を果たす弾性ひずみエネルギーの計算法およびすべり変形を記述するモデルについて説明する。続いて、論文のシミュレーション結果の概要を説明した後、今後の発展性について触れる。

2 研究背景

ラスマルテンサイトは低炭素鋼に現れる重要な組織である。ラスマルテンサイトの特徴として、(1) マルテンサイト相 (α') に高密度の転位が存在する、(2) オーステナイト相 (γ) の $\{111\}_{\gamma}$ または $\{557\}_{\gamma}$ に晶癖面が形成される、(3) γ 相と α' 相の間に Kurdjumov-Sachs (K-S) 方位関係が成立することが知られている^{2,8)}。これらの特徴のうち、晶癖面形成については、マルテンサイト結晶学の現象論（以下、現象論と呼ぶ）に基づいて議論されることが多い⁹⁻¹⁶⁾。現象論では、格子変形やすべり変形を考慮して、マルテンサイト変態における全変形を記述し、 γ 相と α' 相の間に不変面（無ひずみ・無回転の面）が存在する条件を導出する。不変面の存在

条件や方位は、結晶構造、格子対応、格子定数、考慮するすべり系によって変化する。

材料組織形成過程のシミュレーション法としてフェーズフィールド (PF) 法が知られている。PF法では、材料組織を記述するフィールド変数を用いて組織の全自由エネルギーを定式化し、全自由エネルギー減少過程を記述する発展方程式を解析して組織形成過程をシミュレートする¹⁷⁾。Khachaturyanらの研究グループによってマルテンサイト変態のPFモデル¹⁸⁻²²⁾が提案されて以降、鉄鋼材料組織についても、立方晶→正方晶マルテンサイト変態と変態中の塑性変形を考慮したPFシミュレーションが行われてきた²³⁻³³⁾。これまでの研究では、マイクロメカニクスの応用であるフェーズフィールド微視的弾性論^{14,34)}に基づき材料組織の弾性場を数値計算することにより、変態ひずみ、塑性ひずみ、外部応力が組織形成に及ぼす影響がシミュレートされてきた。しかし、PFシミュレーションによってラスマルテンサイトの $\{111\}_{\gamma}$ または $\{557\}_{\gamma}$ 晶癖面の形成が再現されたという報告はなかった。我々は、晶癖面（不変面）の形成は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有利に働くため、変態ひずみと塑性ひずみを考慮したPFシミュレーションによって晶癖面形成は再現されるはずであると考えた。以上が本研究に着手した動機である。

* [今回の対象論文]

塚田祐貴, 小島康宏, 小山敏幸, 村田純教: 「Phase-field Simulation of Habit Plane Formation during Martensitic Transformation in Low-carbon Steels」, ISIJ International, Vol.55 (2015), No.11, pp.2455-2462 (第27回澤村論文賞受賞)

3 弾性ひずみエネルギーの計算法とすべり変形のモデル

本研究で用いたPFモデルの詳細は論文¹⁾を参照していただきたい。ここでは、晶癖面形成に重要な役割を果たす弾性ひずみエネルギーの計算法について説明する。弾性ひずみエネルギーはフェーズフィールド微視的弾性論^{14,34)}に基づき、

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

によって計算される。 C_{ijkl} は弾性定数、 ε_{ij} は全ひずみ、 ε_{ij}^0 はeigenひずみである。 ε_{ij}^0 の空間分布が既知の条件のもと、力学的平衡方程式($\partial \sigma_{ij} / \partial r_j = 0$, $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \{ \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \}$)をフーリエ空間にて解くことにより、 ε_{ij} が計算される。 ε_{ij}^0 は変態ひずみ(ε_{ij}^{trans})と α' 相のすべり変形に起因する塑性ひずみ(ε_{ij}^{slip})の和として、次式にて定義した。

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^{trans}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{ij}^{slip}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

これまで報告されているPFモデル²³⁻³³⁾においても、変態ひずみと塑性ひずみを考慮してeigenひずみが定義されている。本研究で用いたPFモデル¹⁾の最大の特徴は、後述するように、 α' 相の $\{101\}$ $\langle 111 \rangle_{\alpha'}$ すべり系の転位に起因する塑性ひずみを考慮してeigenひずみを定式化したことにある。

本研究で用いたすべり変形のモデルについて述べる前に、Wangらによって提案された転位運動を記述するPFモデル³⁵⁾について説明する。あるすべり系の転位に起因するeigenひずみは

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \frac{b_i n_j}{d} \eta(\mathbf{r}) \quad (3)$$

にて与えられる。 $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ はバーガースベクトル、 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ はすべり面の単位法線ベクトル、 d はすべり面間距離である。また、フィールド変数 η は、転位がすべった回数を表す。Wangらのモデルでは、Fig.1に示すように転

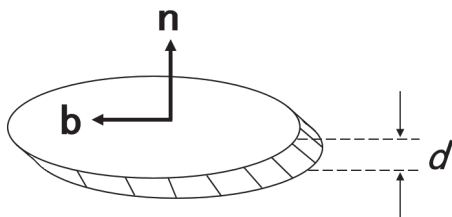


Fig.1 Schematic of a thin coherent inclusion that has the eigenstrain given by Eq. (3). $\mathbf{b}$ is the Burgers vector, $\mathbf{n}$ is the unit vector of the slip plane normal, and d is the interplanar distance of the slip plane.

位ループを薄板状介在物と見なし、そのeigenひずみを式(3)にて与えて、介在物(転位ループ)の形態変化を計算する。このモデルでは、介在物の内部が転位のすべった領域に対応しており、介在物の形態変化を計算することと転位運動を計算することは等価である³⁵⁾。フィールド変数の数を増やせば、複数のすべり系の転位運動を同時に計算することも可能である。転位運動の計算が目的であれば、Wangらのモデルを用いるのが有効である。しかし、転位運動と数百nm～数 μ mのマルテンサイト形成を同時にモデル化する場合、2つの現象のスケールが異なるため、同一の離散格子で解析するための工夫が必要となる。

Zhouらは、個々の転位運動を陽に計算することを避ける目的で、特定のすべり系の転位に起因する塑性ひずみを記述するフィールド変数(転位の密度関数)を新しく定義した³⁶⁾。Fig.2に示すように、あるすべり系を考えた場合、活動したすべり面もすべり量も不均一であるが、活動したすべり面間の平均距離(D)を用いれば等価な塑性変形を記述することができる。本研究においてもZhouらのモデルを採用し、 $\{101\}$ $\langle 111 \rangle_{\alpha'}$ すべり系の転位に起因する塑性ひずみ ε_{ij}^{slip} を次式にて定式化した。

$$\varepsilon_{ij}^{slip}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{n}_{\alpha} \otimes \mathbf{b}_{\alpha} + \mathbf{b}_{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\alpha}}{2|\mathbf{b}_{\alpha}|} p_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

$$p_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{|\mathbf{b}_{\alpha}|}{D_{\alpha}(\mathbf{r})} = \frac{|\mathbf{b}_{\alpha}|}{d_{\alpha} m_{\alpha}(\mathbf{r})} \quad (5)$$

p_{α} はフィールド変数(転位の密度関数)、 D_{α} は活動したすべり面間の平均距離、 d_{α} はすべり面間距離、 m_{α} は活動したすべり面間に含まれる格子面数、 α は α' 相のすべり系を区別する番号である。なお、PFモデルでは立方晶→正方晶マルテンサイト変態により生じる3つの正方晶バリエーション(Bain

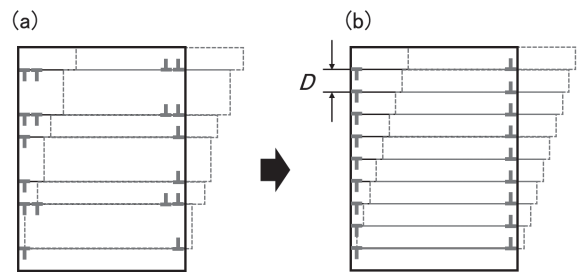


Fig.2 Schematic of the shear deformation of a slip system. Generally, sheared regions are distributed inhomogeneously and the amount of shear varies according to position (see (a)). However, the equivalent total shear deformation can be realized even if it is assumed that the sheared regions distribute homogeneously and the amount of shear is equal at any positions; the total shear deformation can be described by D , which is the average spacing between neighboring sheared regions by dislocations (see (b)).

バリエーション)を考慮しており、各バリエーションについて $\{101\}\langle 111\rangle_{\alpha'}$ すべり系の転位に起因する塑性ひずみを定式化した。

4 シミュレーション結果の概要

論文のシミュレーション結果の概要は以下の通りである¹⁾。Fe-0.1mass% Cを対象としたシミュレーションにおいて、3つのBainバリエーションが出現してマルテンサイト変態が進行し、 $(111)_{\gamma}$ に晶癖面が出現する様子が再現された。一方、 α' 相のすべり変形を考慮しないシミュレーションでは晶癖面形成が再現されないことから、 α' 相のすべり変形による弾性ひずみエネルギー緩和が $(111)_{\gamma}$ 晶癖面形成に重要な役割を果たしていると結論付けた。ここで強調すべき点は、モデリングにおいて γ 相と α' 相の格子対応と格子定数から変態ひずみを算出し、かつ、 α' 相の $\{101\}\langle 111\rangle_{\alpha'}$ すべり系の活動を仮定したが、それ以外には、シミュレーションにおいて $(111)_{\gamma}$ 晶癖面形成を保障するような条件は一切与えていないことにある。すなわち、あくまで α' 相のすべり変形による弾性ひずみエネルギー緩和の結果として $(111)_{\gamma}$ 晶癖面が形成する様子が再現されたのである。

論文の中ではさらに、シミュレーションで得られたすべり変形量が晶癖面形成条件を満たしているかどうかを調査した。計算方法の詳細は割愛するが、まず現象論に基づき、シミュレーションで仮定した α' 相の4つのすべり系において活動したすべり面間に含まれる格子面数 m_{α} (式(5)参照)を変数とし、不変面形成条件を求めた。 $m_1-m_2-m_3-m_4$ 空間にPFシミュレーションで得られたすべり変形量をプロットすると、不変面形成条件の近傍にシミュレーション結果が分布していることが確認された。これは、すべり変形が生じる条件においても、晶癖面形成が弾性ひずみエネルギー緩和に有利に働くことを示唆する結果である。なお、論文では、 α' 相の4つのすべり系を仮定したが、このことは $(111)_{\gamma}$ 晶癖面が形成するための十分条件であって必要条件ではない。すなわち、考慮するすべり系の数を増やした場合も $(111)_{\gamma}$ 晶癖面が形成する可能性はある。

5 今後の発展性

本稿で紹介した論文は、 γ 相と α' 相の晶癖面に着目した研究であり、3つのBainバリエーション間の界面(ラスマルテンサイトの階層構造のブロック界面⁸⁾)が特定の結晶面に沿って形成するかどうかは明らかになっていない。また、論文ではシミュレーション結果を現象論と比較する目的で、 α' 相のすべり変形のみを考慮したが、実際には変態の過程で γ 相のすべり変形も生じることが報告されている³⁷⁻³⁹⁾。我々は最近、

γ 相のすべり変形まで考慮したPFシミュレーションに取り組んでおり、 γ 相と α' 相の晶癖面だけでなくブロック界面も $(111)_{\gamma}$ 近傍に形成する結果が得られている。鉄鋼材料組織に限らず、PF法を用いて対象とする組織形成をモデル化することにより、その組織形成のメカニズムを深く理解することができる。今後、PFシミュレーション研究によって、低炭素鋼のマルテンサイト形成機構に対する理解がさらに進むと考えている。

参考文献

- 1) Y. Tsukada, Y. Kojima, T. Koyama and Y. Murata : ISIJ Int., 55 (2015), 2455.
- 2) M. Kehoe and P.M. Kelly : Scr. Metall., 4 (1970), 473.
- 3) B.P.J. Sandvik and C.M. Wayman : Metall. Trans. A, 14 (1983), 809.
- 4) P.M. Kelly, A. Jostsons and R.G. Blake : Acta Metall. Mater., 38 (1990), 1075.
- 5) S. Morito, H. Tanaka, R. Konishi, T. Furuhashi and T. Maki : Acta Mater., 51 (2003), 1789.
- 6) S. Morito, J. Nishikawa and T. Maki : ISIJ Int., 43 (2003), 1475.
- 7) H. Kitahara, R. Ueki, N. Tsuji and Y. Minamino : Acta Mater., 54 (2006), 1279.
- 8) S. Morito, X. Huang, T. Furuhashi, T. Maki and N. Hansen : Acta Mater., 54 (2006), 5323.
- 9) J.S. Bowles and J.K. Mackenzie : Acta Metall., 2 (1954), 129.
- 10) J.K. Mackenzie and J.S. Bowles : Acta Metall., 2 (1954), 138.
- 11) J.S. Bowles and J.K. Mackenzie : Acta Metall., 2 (1954), 224.
- 12) B.P.J. Sandvik and C.M. Wayman : Metall. Trans. A, 14 (1983), 835.
- 13) P.M. Kelly : Mater. Trans., JIM, 33 (1992), 235.
- 14) A.G. Khachaturyan : Theory of structural transformations in solids, Dover, New York, (2008)
- 15) K. Iwashita, Y. Murata, Y. Tsukada and T. Koyama : Philos. Mag., 91 (2011), 4495.
- 16) L. Qi, A.G. Khachaturyan and J.W. Morris Jr. : Acta Mater., 76 (2014), 23.
- 17) L. Q. Chen : Ann. Rev. Mater. Res., 32 (2002), 113.
- 18) Y. Wang and A.G. Khachaturyan : Acta Mater., 45 (1997), 759.
- 19) A. Artemev, Y. Jin and A.G. Khachaturyan : Acta Mater., 49 (2001), 1165.

- 20) Y.M.Jin, A.Artemev and A.G.Khachaturyan : Acta Mater., 49 (2001), 2309.
- 21) Y.Wang and A.G.Khachaturyan : Mater. Sci. Eng. A, 438-440 (2006), 55.
- 22) W.Zhang, Y.M.Jin and A.G.Khachaturyan : Acta Mater., 55 (2007), 565.
- 23) V.I.Levitas and A.V.Idesman : Philos. Mag. A, 82 (2002), 429.
- 24) A.Yamanaka, T.Takaki and Y.Tomita : Mater. Sci. Eng. A, 491 (2008), 378.
- 25) H.K.Yeddu, A.Malik, J.Ågren, G.Amberg and A.Borgenstam : Acta Mater., 60 (2012), 1538.
- 26) H.K.Yeddu, A.Borgenstam, P.Hedström and J.Ågren : Mater. Sci. Eng. A, 538 (2012), 173.
- 27) A.Malik, H.K.Yeddu, G.Amberg, A.Borgenstam and J.Ågren : Mater. Sci. Eng. A, 556 (2012), 221.
- 28) H.K.Yeddu, V.I.Razumovskiy, A.Borgenstam, P.A.Korzhavyy, A.V.Ruban and J.Ågren : Acta Mater., 60 (2012), 6508.
- 29) Z.Cong, Y.Murata, Y.Tsukada and T.Koyama : Mater. Trans., 53 (2012), 1598.
- 30) Z.Cong, Y.Murata, Y.Tsukada and T.Koyama : Mater. Trans., 53 (2012), 1822.
- 31) Z.Cong, Y.Murata, Y.Tsukada and T.Koyama : Philos. Mag., 93 (2013), 1739.
- 32) H.K.Yeddu, A.Borgenstam and J.Ågren : Acta Mater., 61 (2013), 2595.
- 33) A.Malik, G.Amberg, A.Borgenstam and J.Ågren : Acta Mater., 61 (2013), 7868.
- 34) T.Mura : Micromechanics of defects in solids, second, revised edition, Kluwer Academic, Dordrecht, (1987)
- 35) Y.U.Wang, Y.M.Jin, A.M.Cuitiño and A.G.Khachaturyan : Acta Mater., 49 (2001), 1847.
- 36) N.Zhou, C.Shen, M.Mills and Y.Wang : Philos. Mag., 90 (2010), 405.
- 37) A.Shibata, S.Morito, T.Furuhara and T.Maki : Scr. Mater., 53 (2005), 597.
- 38) A.Shibata, S.Morito, T.Furuhara and T.Maki : Acta Mater., 57 (2009), 483.
- 39) G.Miyamoto, A.Shibata, T.Maki and T.Furuhara : Acta Mater., 57 (2009), 1120.

(2017 年 9 月 15 日受付)