

Quantitative Phase Field に要求される機能の検討

弊社開発に対する機能追加と
修正に関して

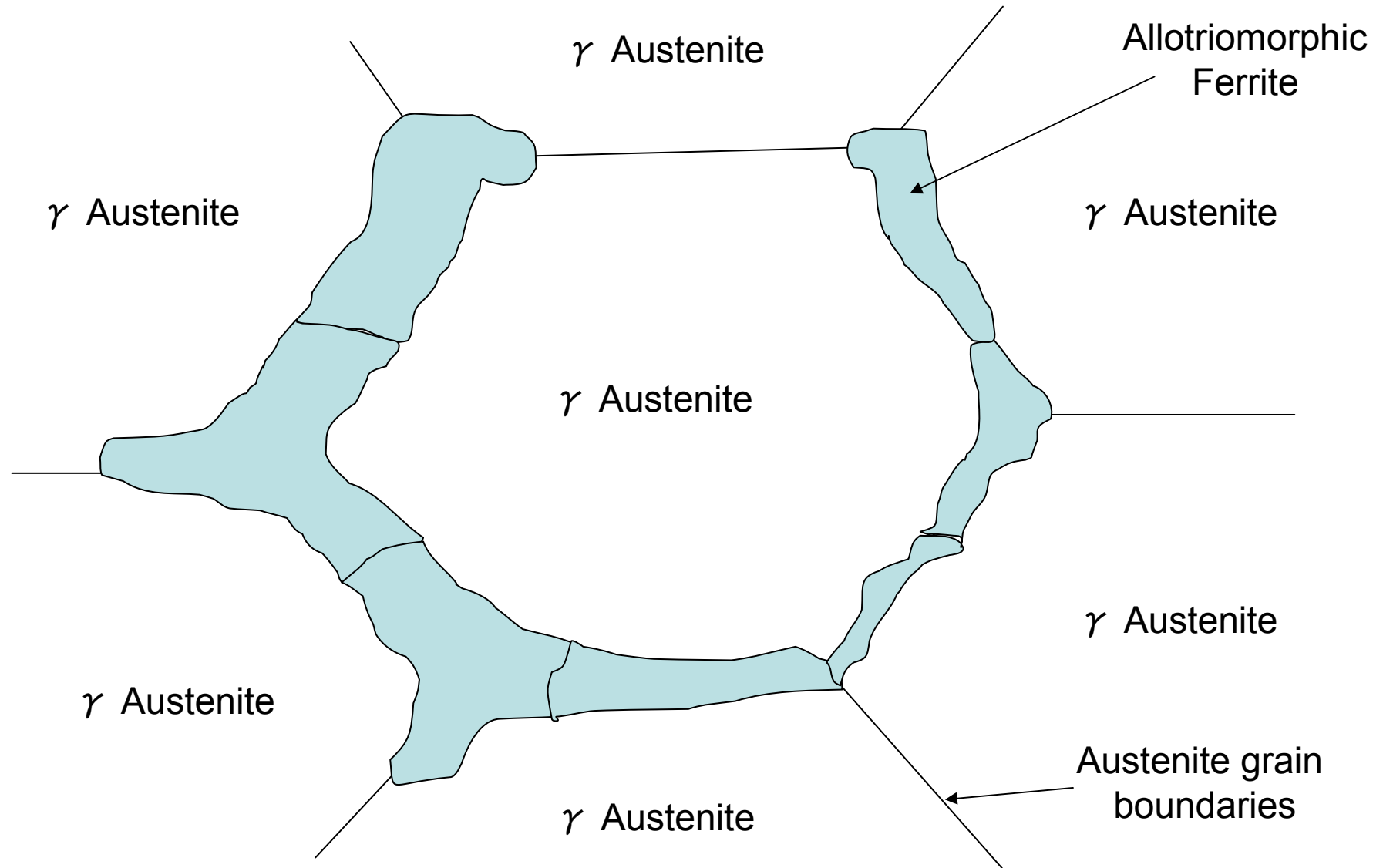
Fe-(X)-Cを題材に

Fe-(X)-Cを例に、そこに存在するいくつかの相について支配的な生成・成長の機構を検討し、それを定量的にSimulateするのに要求されるPhase Field Methodの要素を確認する。

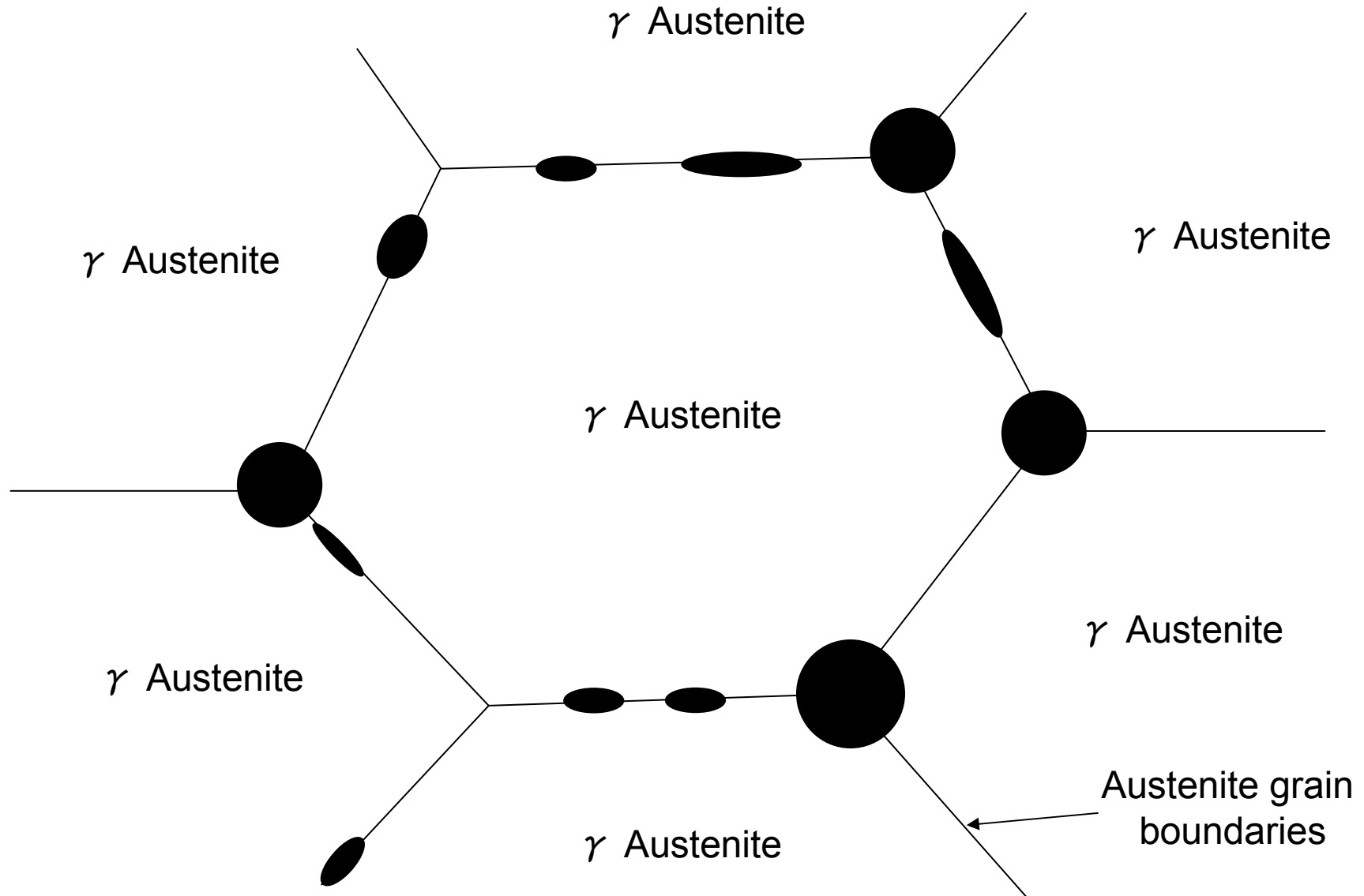
Fe-(X)-Cのいくつかの相

- Allotriomorphic Ferrite
- Idiomorphic Ferrite
- Widmanstätten Ferrite
- Bainite
- Carbide
- Martensite

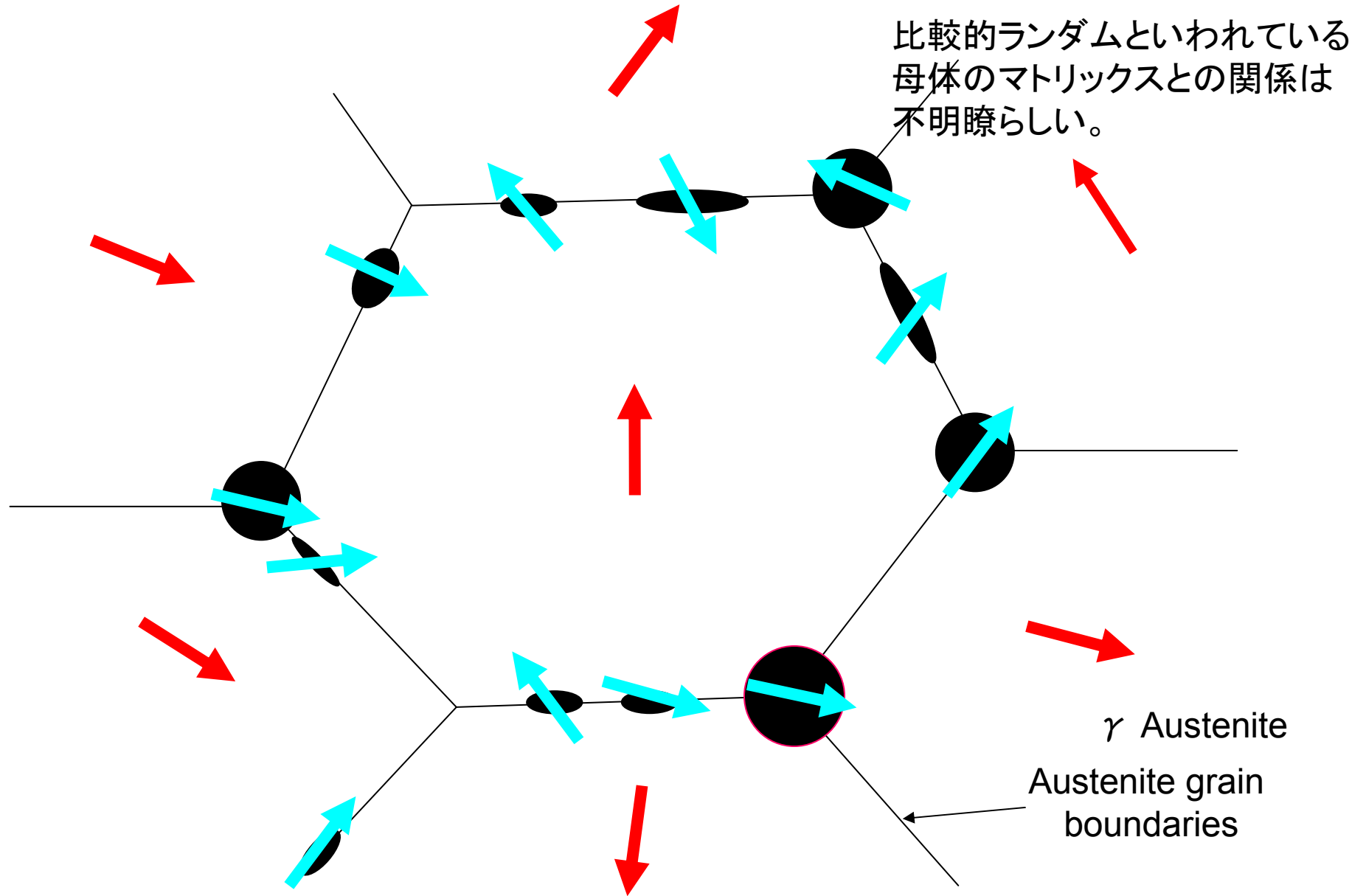
Allotriomorphic Ferrite



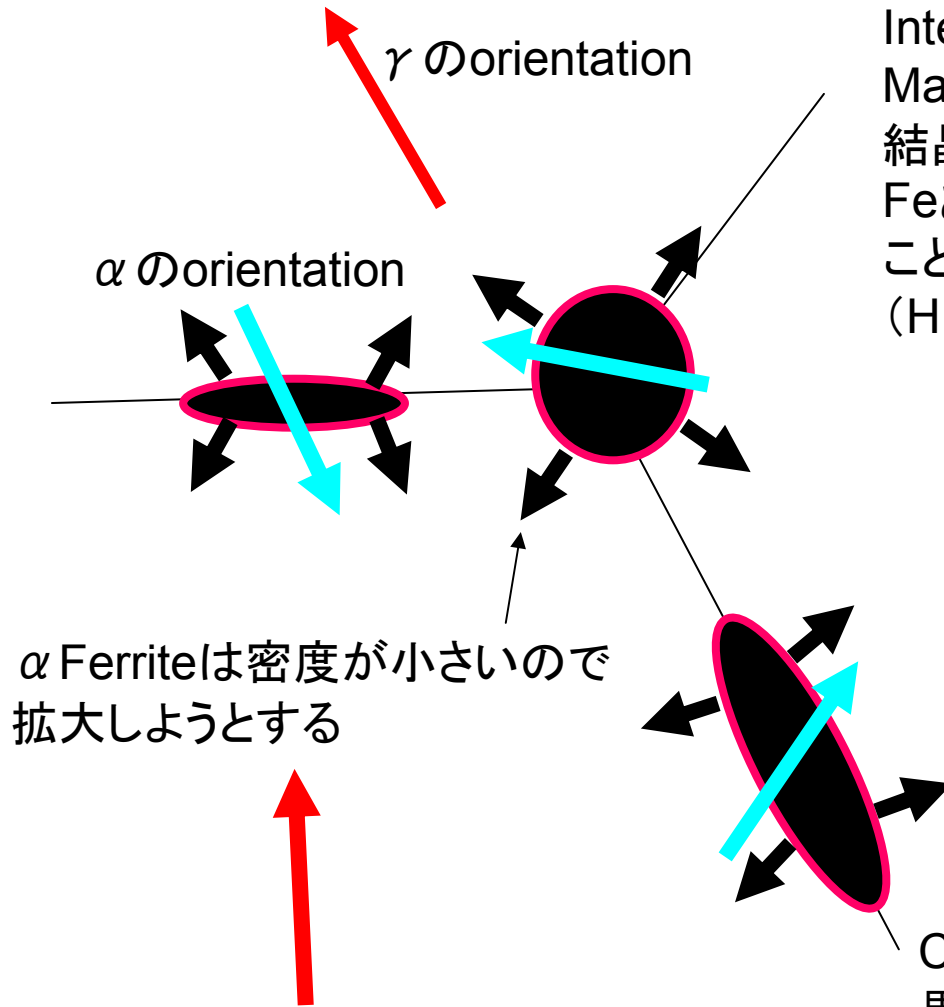
Nucleation 1 site



Nucleation 2 orientation



Growth 1 interface

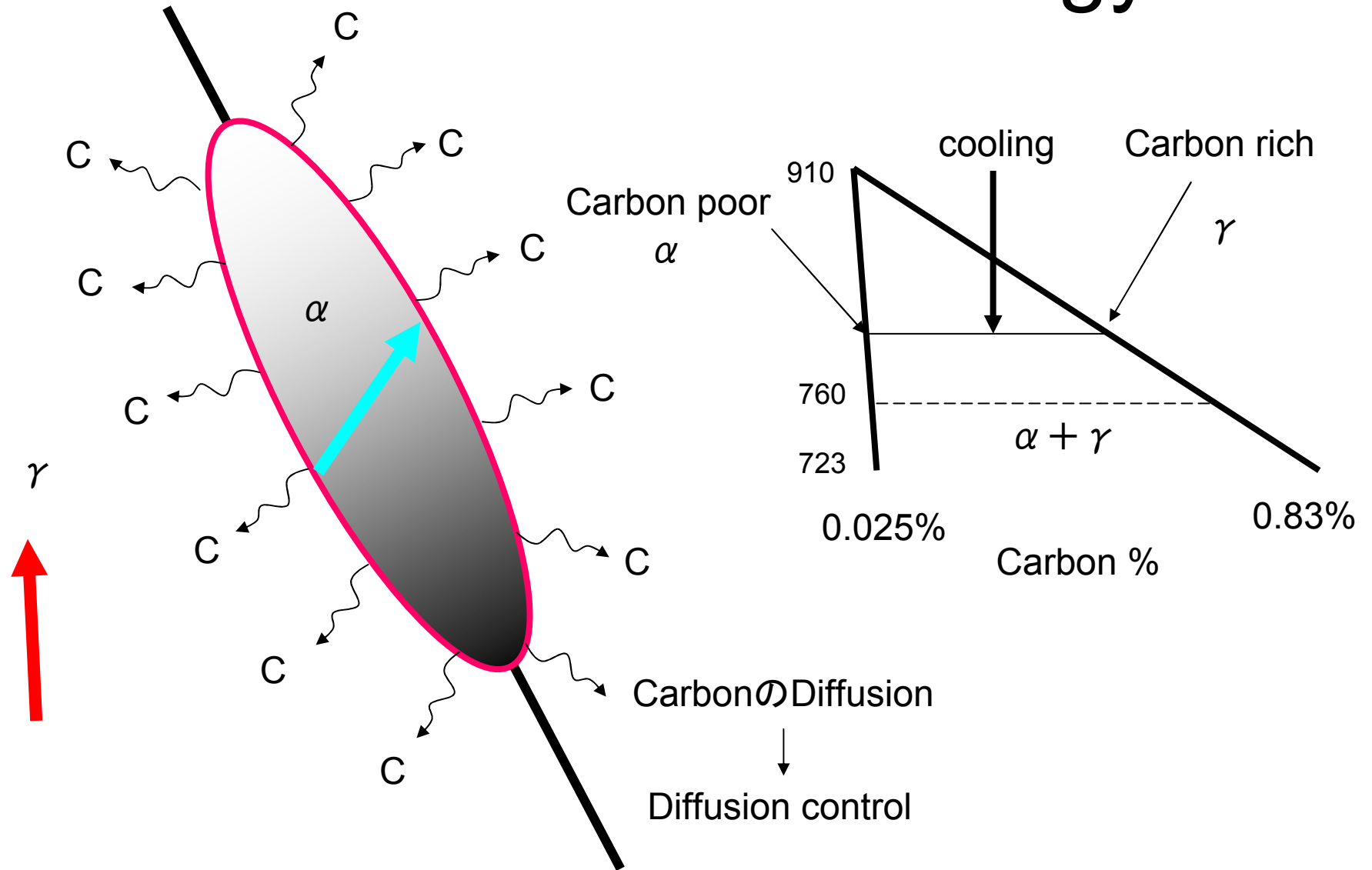


InterfaceはIncoherentである。
Martensiteに見られるような母体のmatrixの
結晶方位との相関はほとんどないらしい。
FeあるいはXのmobilityが高温で十分大きい
ことからreconstructiveなどとして分類している。
(H.K.D.H.Bhadeshia)

弾性エネルギーは流体的に取り扱う。
(Austeniteの密度 > Ferriteの密度)
任意の結晶方位の間の界面における
表面エネルギーの評価が必要。

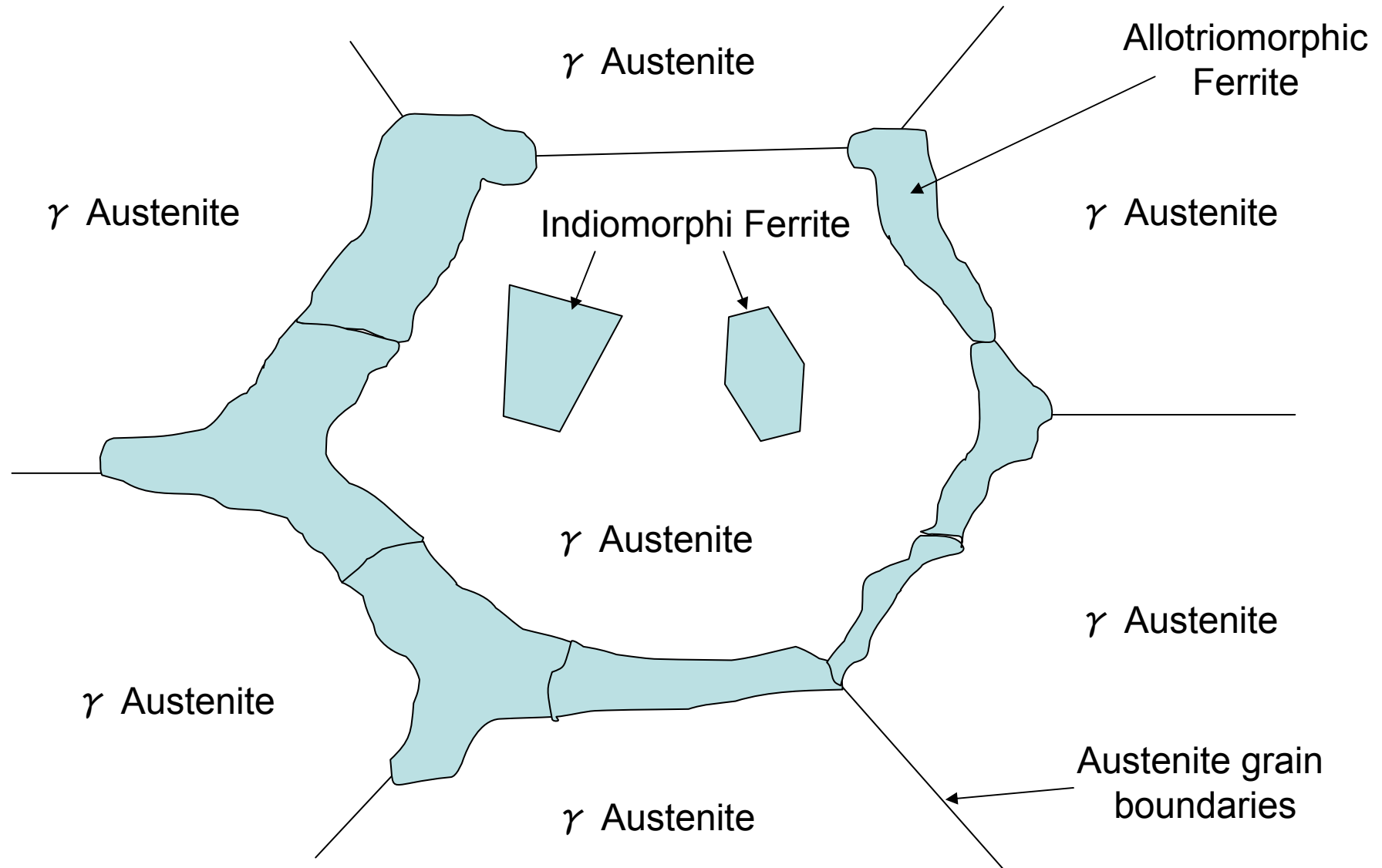
CALPHADのデータを修正して
界面エネルギーを適切に取り込む必要がある。

Growth 2 bulk free energy



Austeniteのgrain boundaryのSurface energyは界面方向のgrowthをdriveする？

Indiomorphic Ferrite



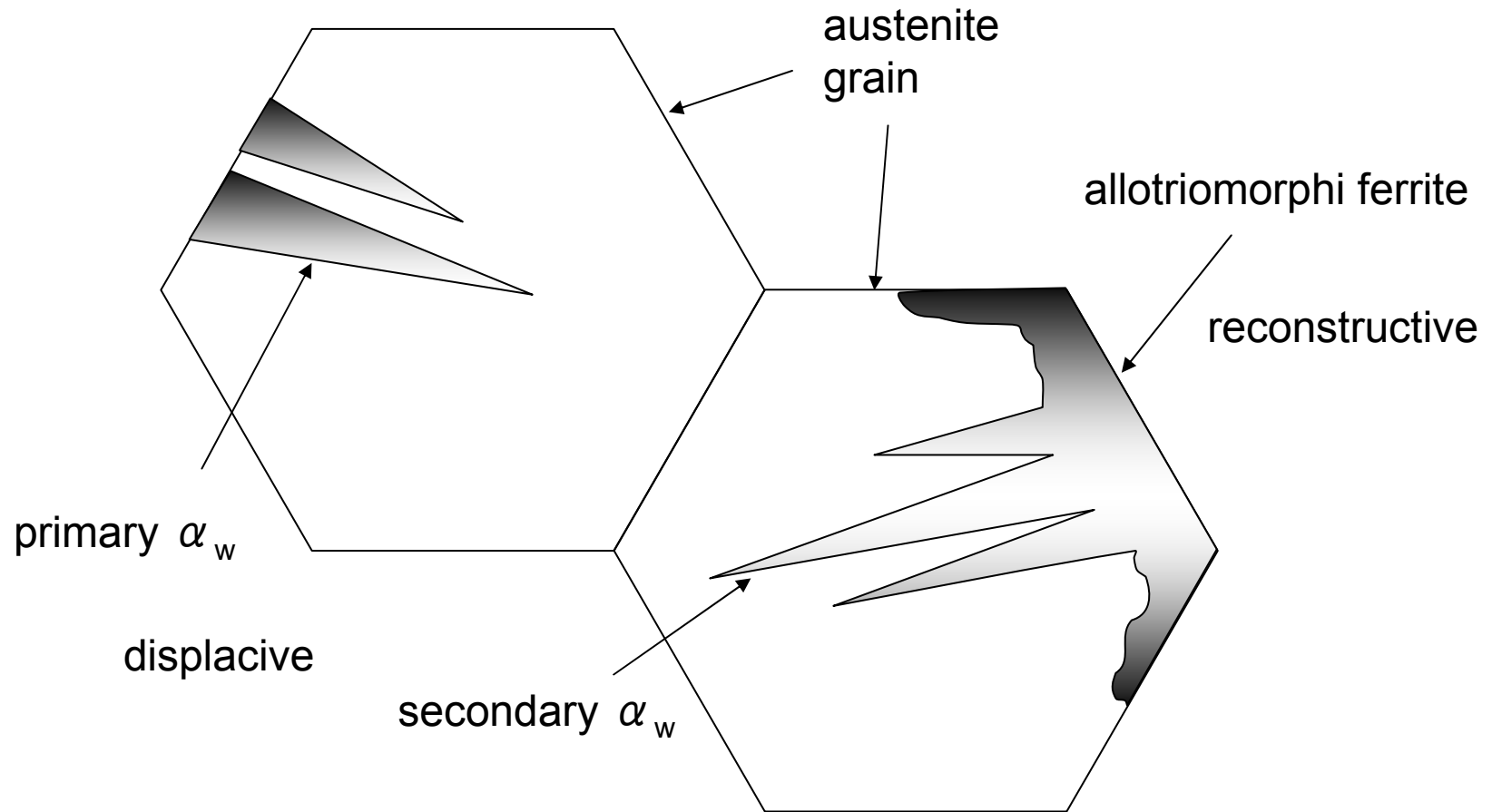
Indiomorphic Ferrite tend to nucleate heterogeneously on non-metallic inclusions present in the steel. (H.K.D.H. Bhadeshia)

growth をdriveするmechanismは Allotriomorphic Ferriteとほとんど同じ。
(Reconstructive diffusion)

追加を要する機能 1

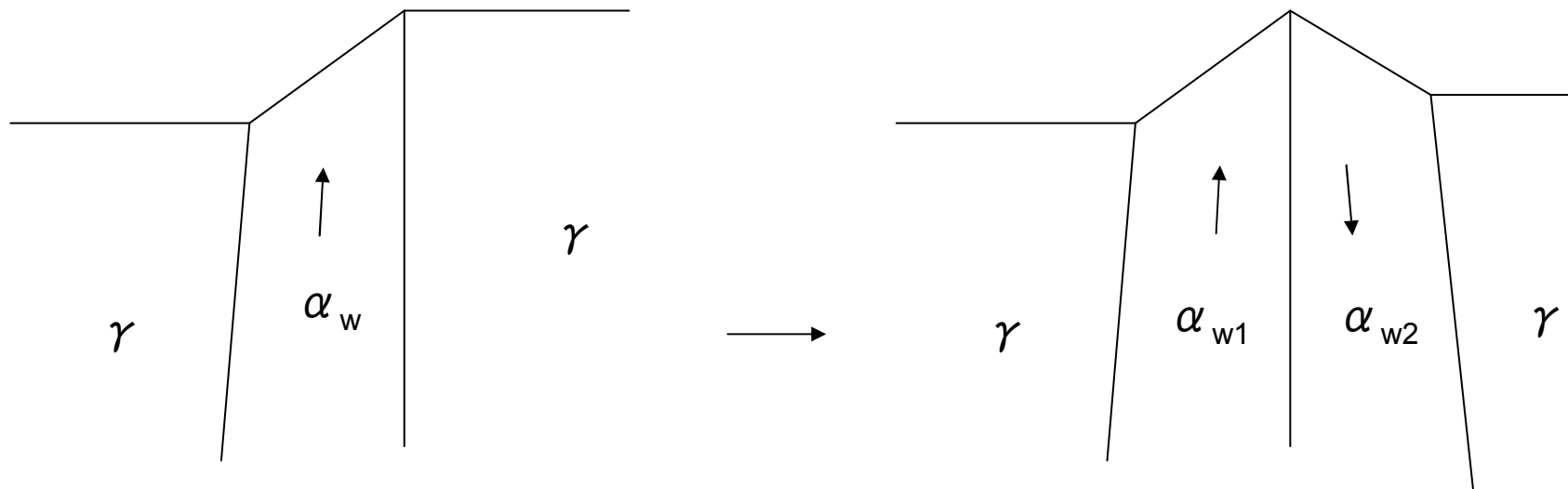
- Environment dependentなNucleation機能
- 任意の相間の任意のorientation, inclination
関係に対応する表面エネルギーの組み込み
- 母体matrixのmobilityが高く、inclusionの
strainのshear成分を考慮しなくてよい場合
(?)のelastic energyの組み込み

Widmanstätten Ferrite



From H.K.D.H.Bhadeshia

2つのMartensite plateが協調的に成長することで歪みエネルギーを緩和する



大きな歪エネルギーを生じる

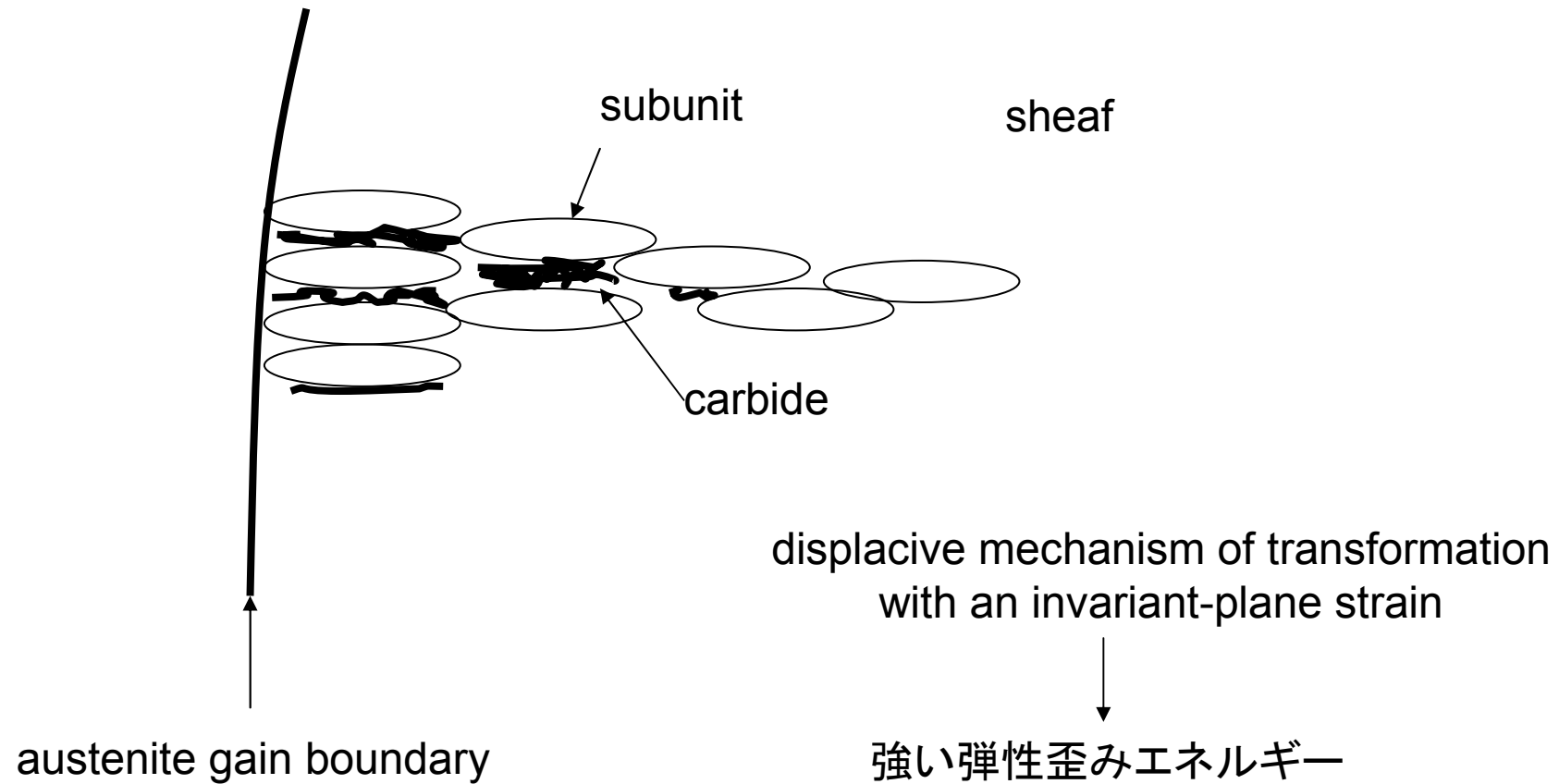
歪エネルギーを緩和する

比較的高温 (Ferriteにとっては小さいdriving force) にもかかわらずdisplaciveなmartensiteが形成できるmechanismを与える。(H.K.D.H.Bhadeshia)

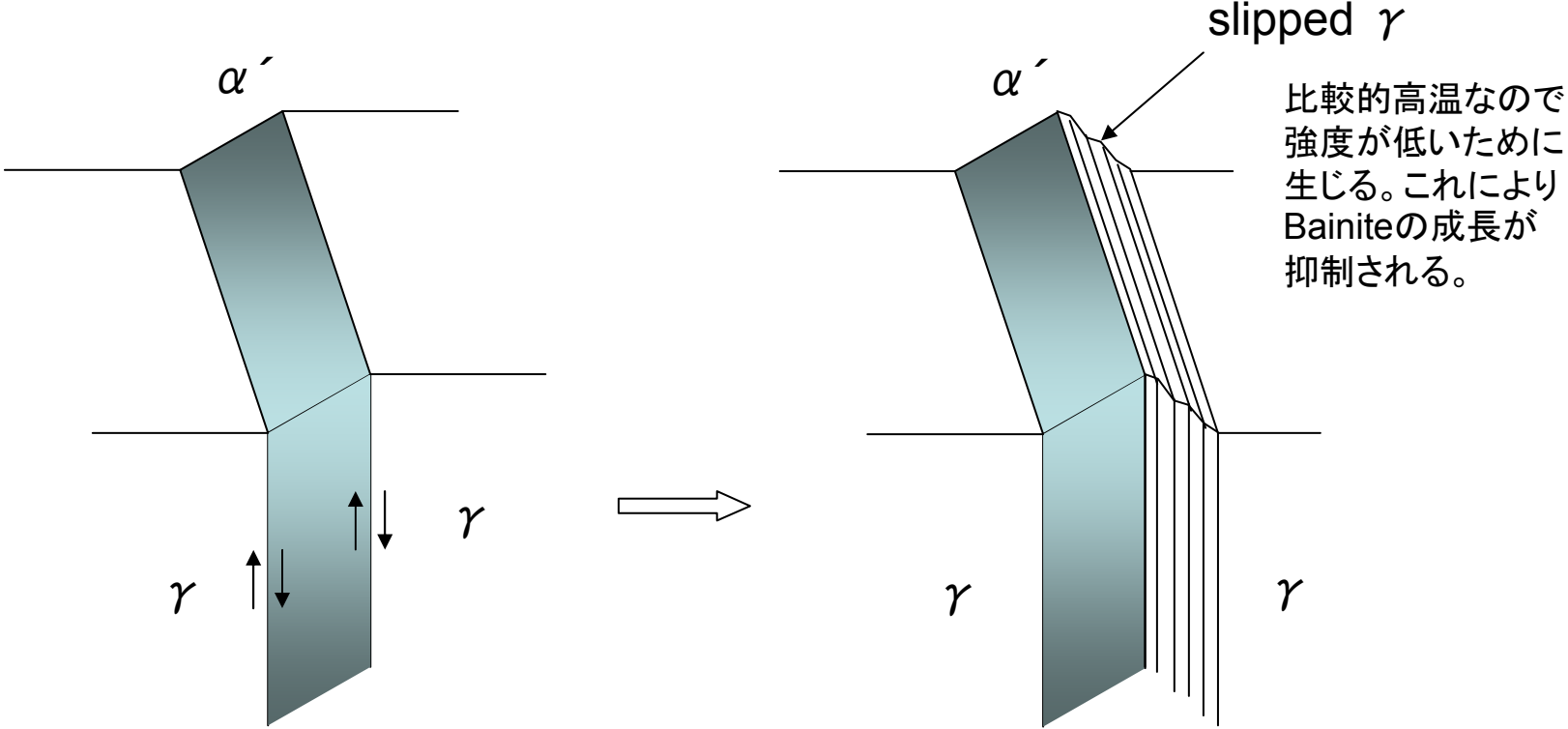
追加を要する機能 2

- Martensite phaseの導入
 - habit plane
 - orientation relationships
 - simple shear
 - uniaxial strain
 - surface energyで特徴付けられるphaseを定義して歪み弾性エネルギーを正確に評価する。
- Simultaneous and cooperative formation of a pair of adjacent, self-accomodating platesの組み込み。

bainite



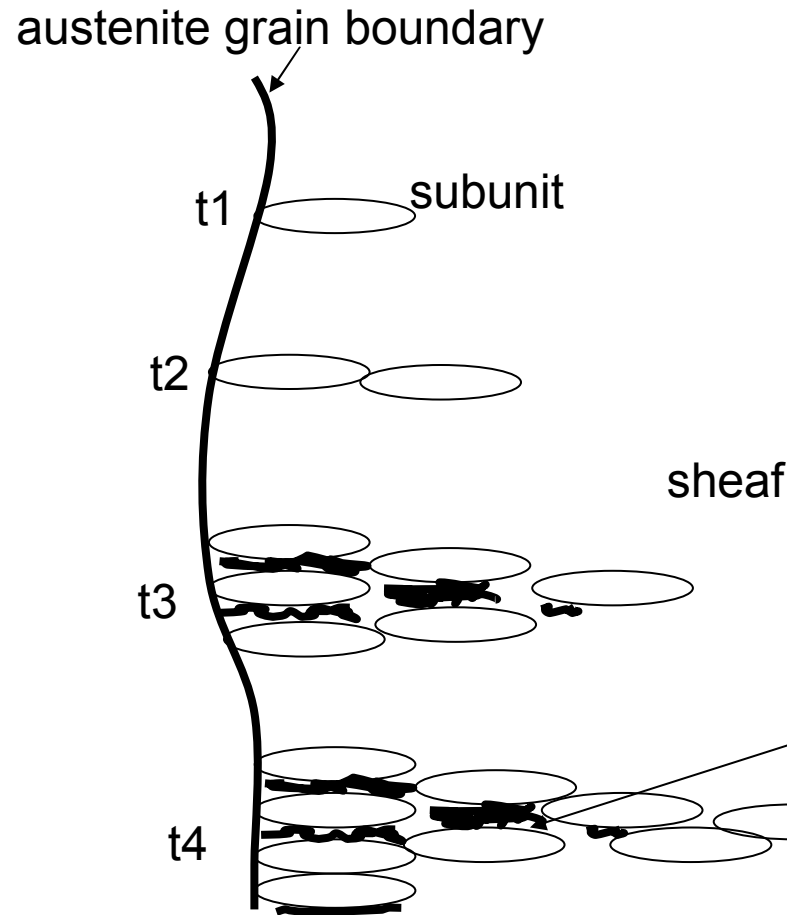
Surface relief due to a bainite sub-unit



強いせん断応力がかかる

plastic relaxationによるせん断応力の緩和

Bainite sheafの時間発展



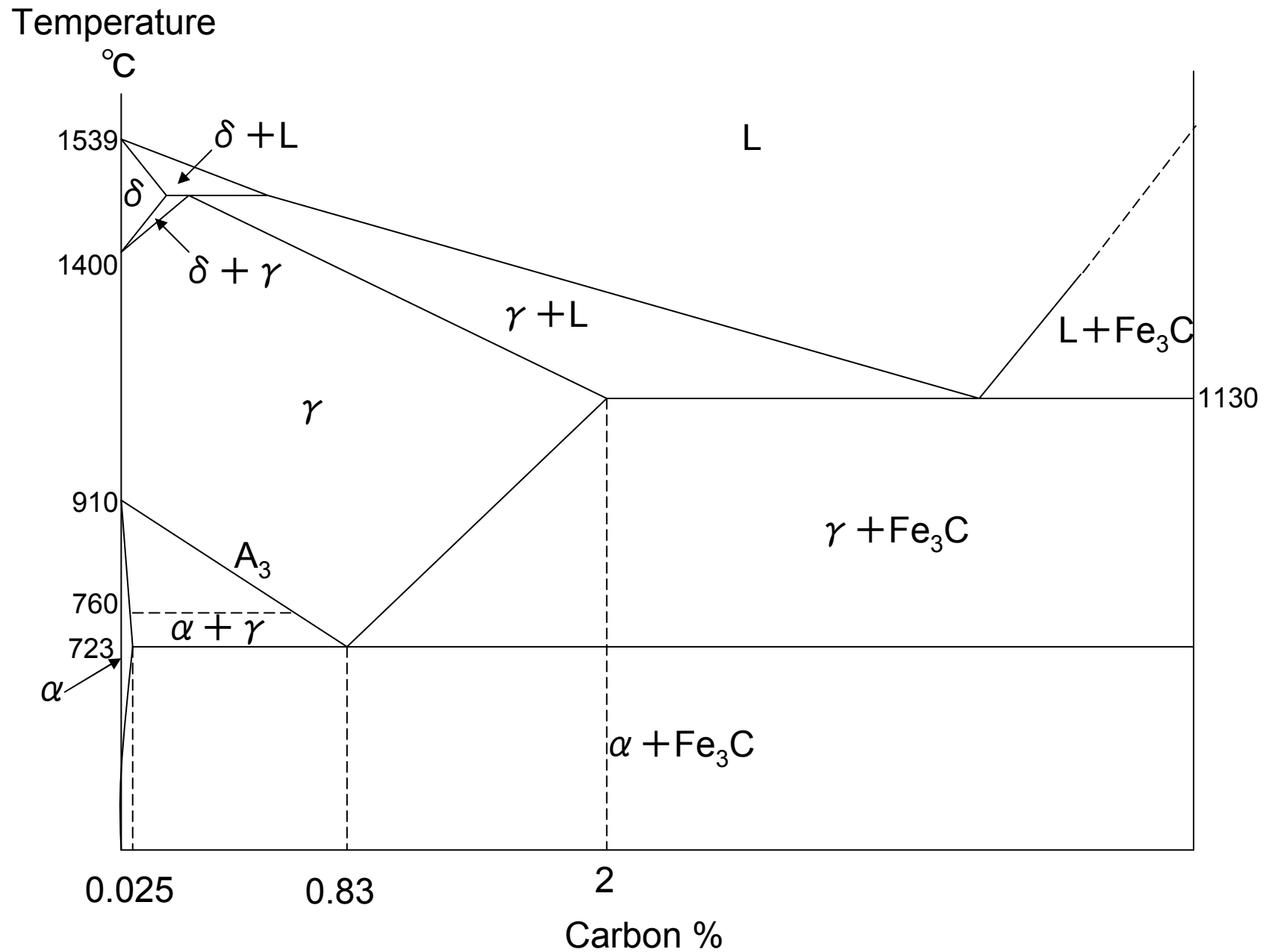
plastic deformationの効果で
bainite plateの成長はあるところ
で止まって、そこから新しいplate
の成長があらためて始まる。

bainiteがdisplasiveに形成されるとcarbon
が追い出されて、austenite上でsaturateして
形成されるらしい。carbonの量がaustenite
上である一定の値を超えるとbainiteは生成
されなくなるらしい。

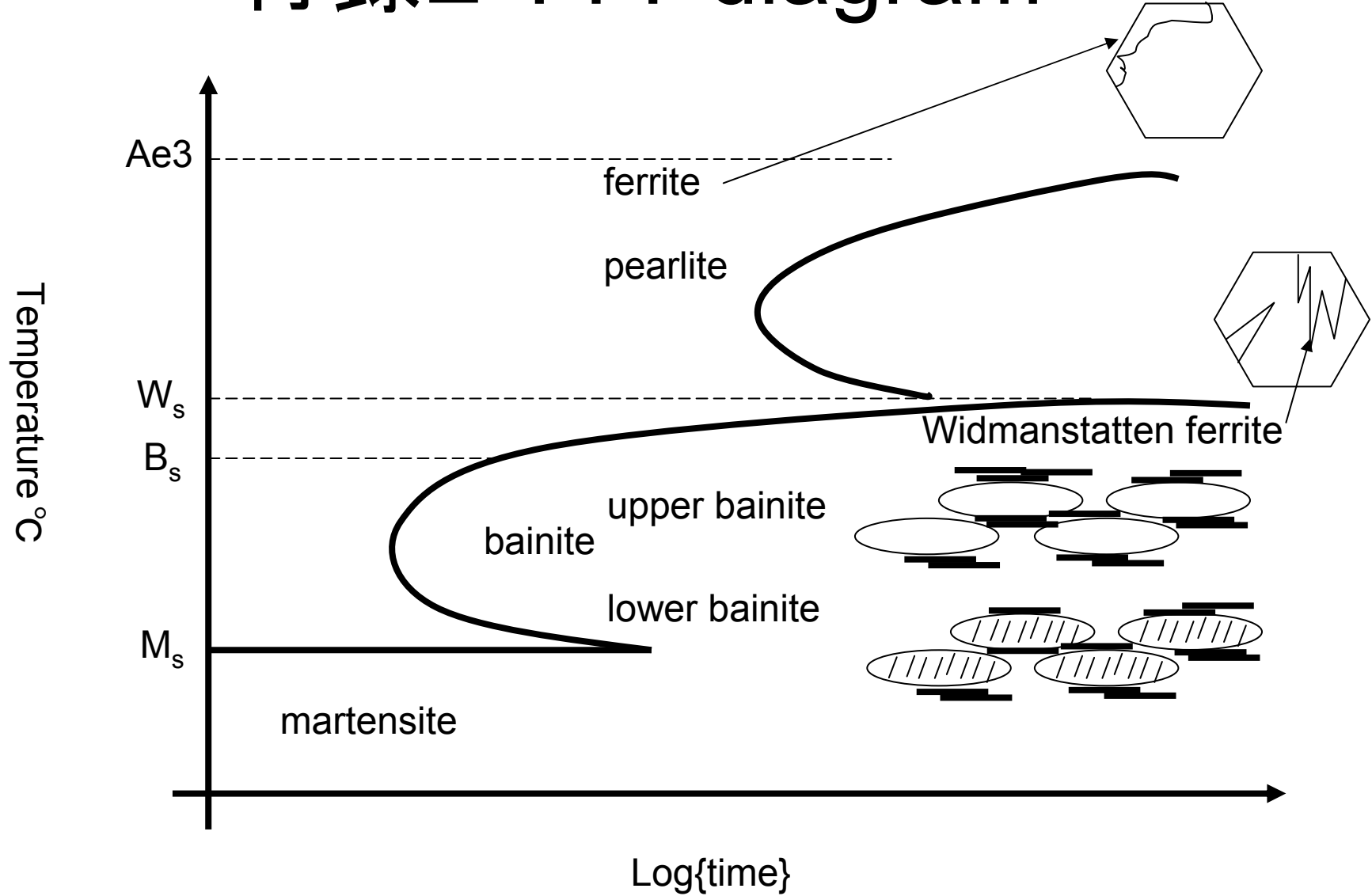
追加を要する機能 3

- plastic deformationあるいはtwinsなども含めて扱うにはmicromechanicsの手法を取り込む必要がある。支配的なフェーズの時間、空間のオーダーとmicromechanicsで扱われる現象の時間、空間のオーダーを吟味して連成させる必要がある。
- Nucleation siteならびに上記micromechanicsの関係でdislocation等のdynamicsも考慮する必要があるらしい。

付録1 Phase diagramの概略



付録2 TTT diagram



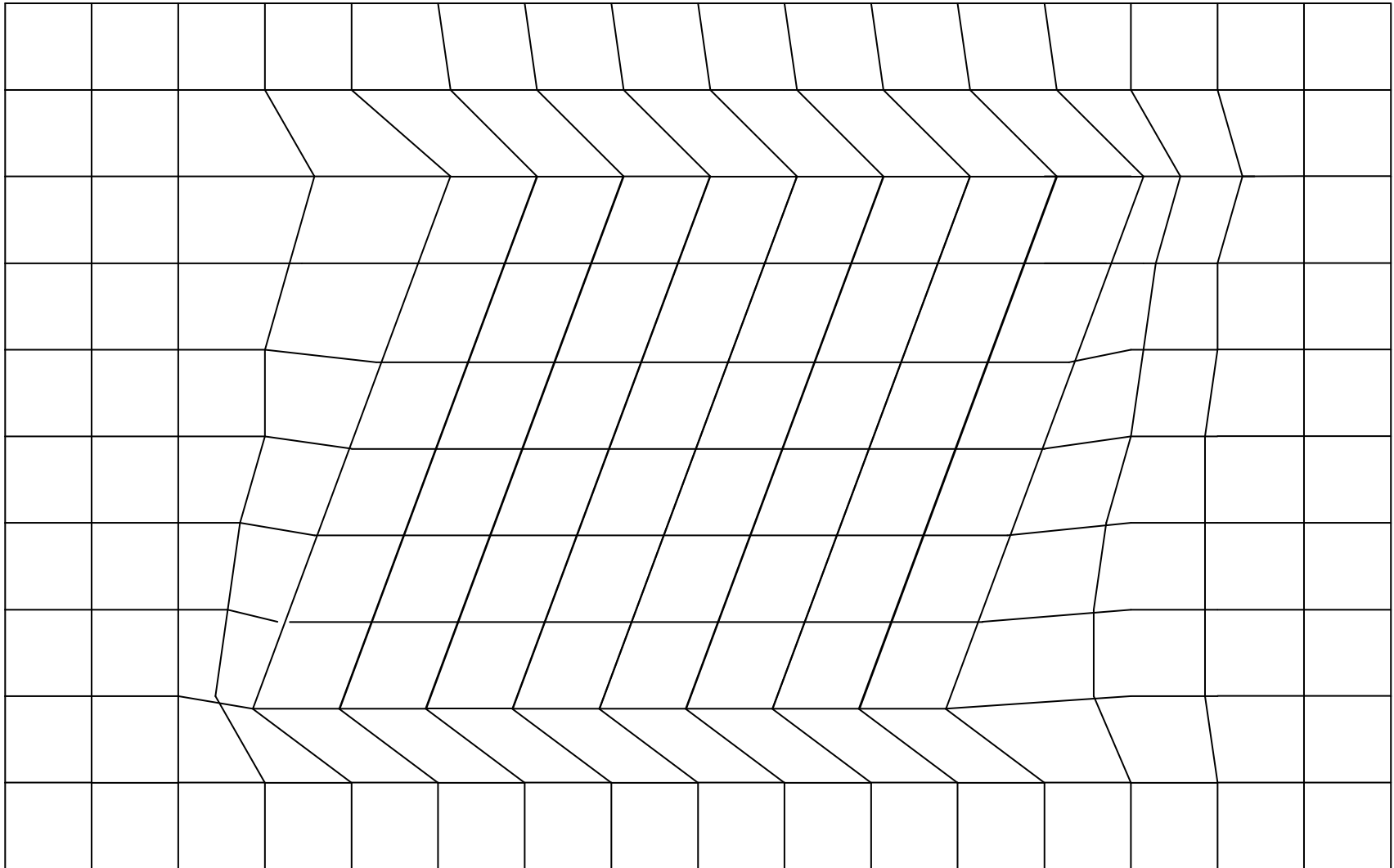
付録3 Feの結晶構造

- α Ferrite BCC構造 室温 \sim 760 $^{\circ}$ C
- β Ferrite BCC構造 760 $^{\circ}$ C \sim 910 $^{\circ}$ C
- γ Austenite FCC構造 910 $^{\circ}$ C \sim 1400 $^{\circ}$ C
- δ Ferrite BCC構造 1400 $^{\circ}$ C \sim 1539 $^{\circ}$ C

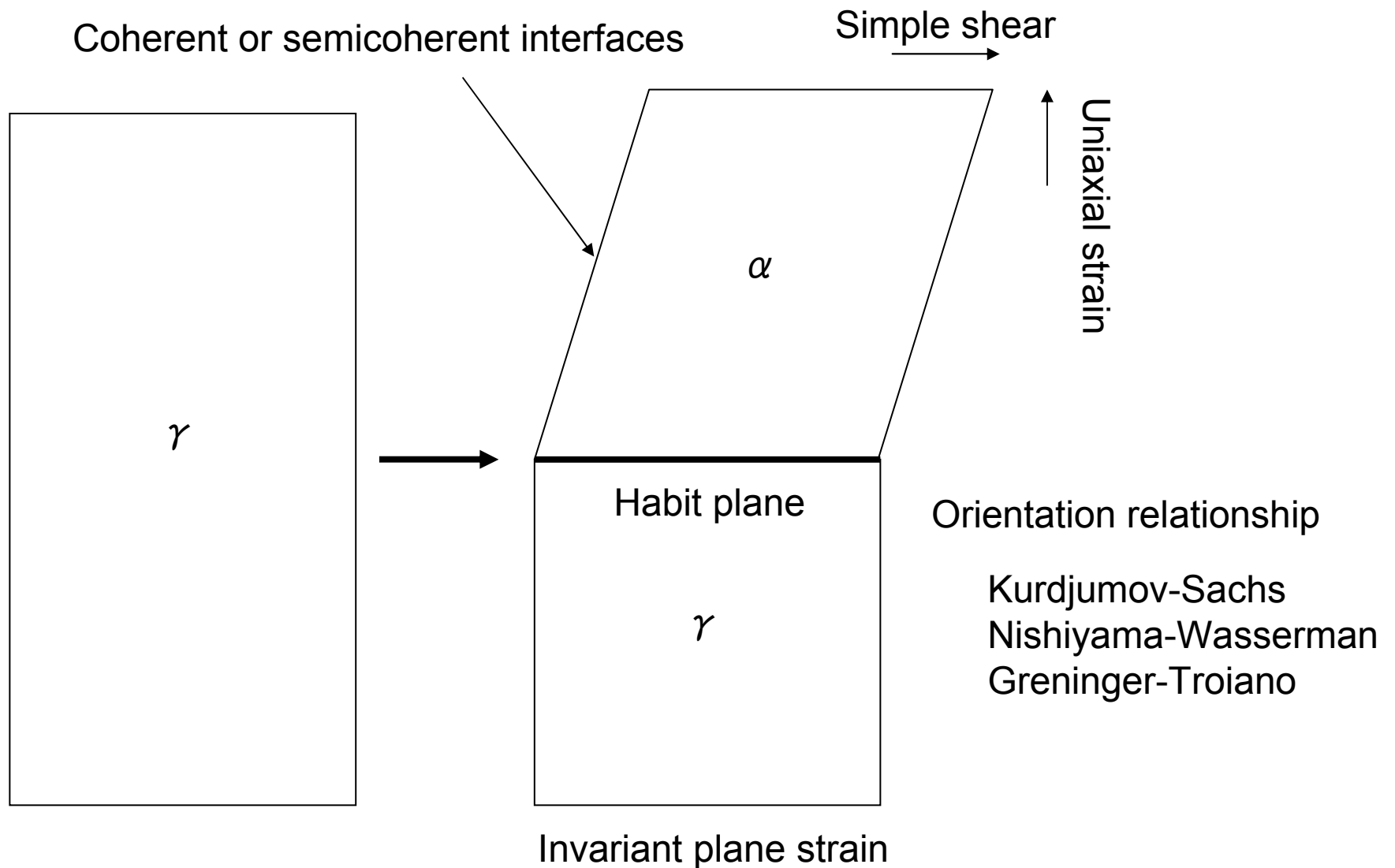
BCC 密度 小

FCC 密度 大

付録4 Coherent inclusion



付録5 Martensite Transformation



付録6 Typical energies associated with martensitic transformation

- Strain energy 600J/mol
- Twin interface energy 100J/mol
- γ / α' interface energy 1J/mol
- Stored energy due to dislocations 20J/mol