



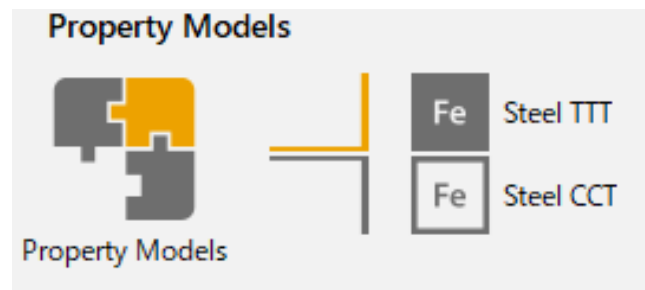
Thermo-Calc Software

鉄鋼向けプロパティモデルについて

鉄鋼向けプロパティモデルはマルテンサイトやベイナイト、パーライトなど鉄鋼材料に関わる計算モデルが用意されており、マルテンサイト温度や分率、強度、変態温度のほか、TTTやCCTなどの評価が可能です。

計算モデル：

- マルテンサイト温度
- マルテンサイト分率
- 臨界変態温度
- パーライト
- ベイナイト
- フェライト
- TTT
- CCT
- マルテンサイト鋼強度



Steel Models

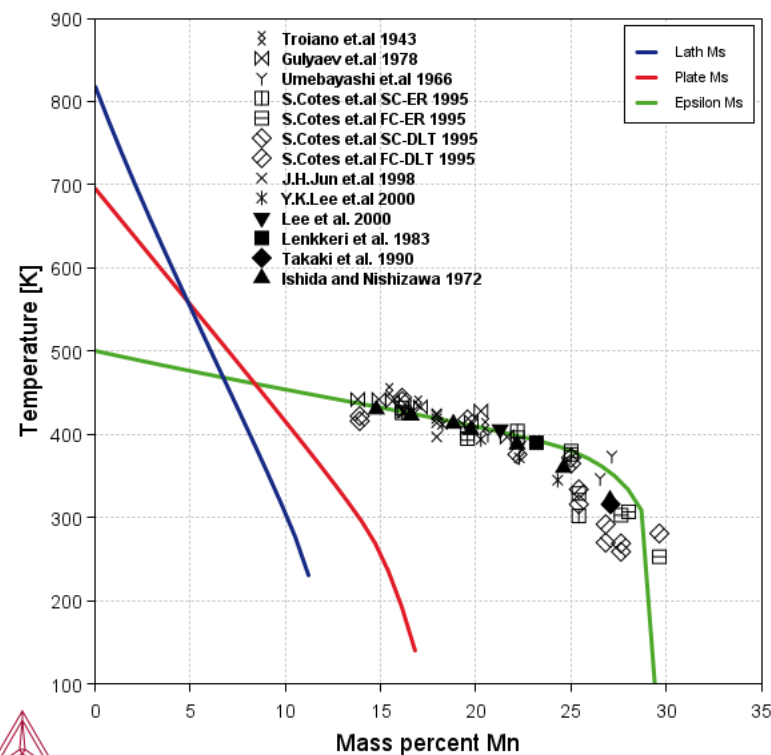
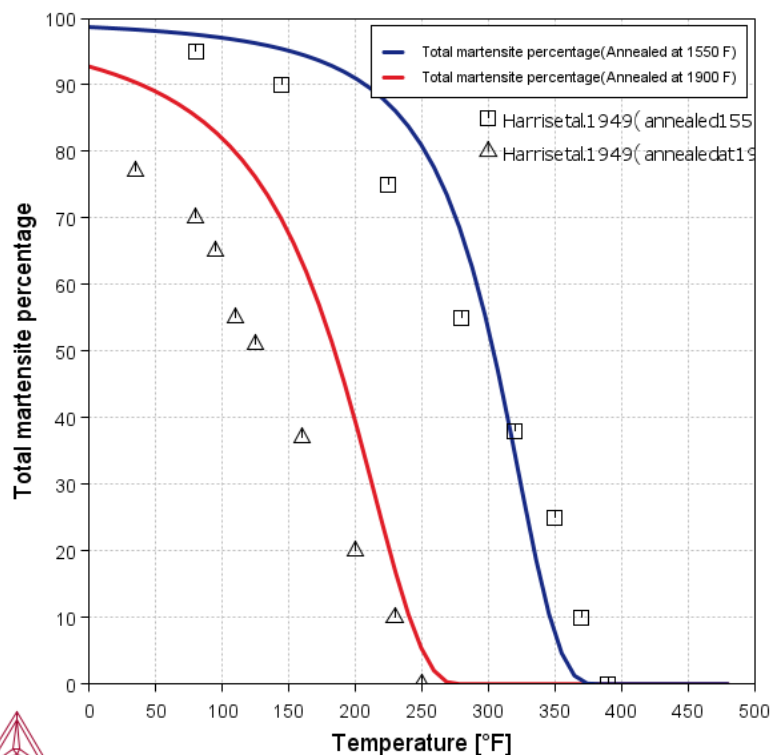
- ☐ Bainite
- ☐ CCT Diagram
- ☐ Critical Transformation Temperatures
- ☐ Ferrite
- ☐ Martensite Fractions
- ☐ Martensite Temperatures
- ☐ Martensitic Steel Strength
- ☐ Pearlite
- ☐ TTT Diagram

鉄鋼向けプロパティモデルの使用にはTCFE9+MOBFE4 以降のデータベースと保守ライセンスが必要です（鉄鋼向けプロパティモジュールの専用ライセンスを付与）

マルテンサイト変態分率

マルテンサイト温度(M_s)モデル

- 変態開始/終了 (TTT線図)
- Lath, Plateなどの形態を考慮した計算

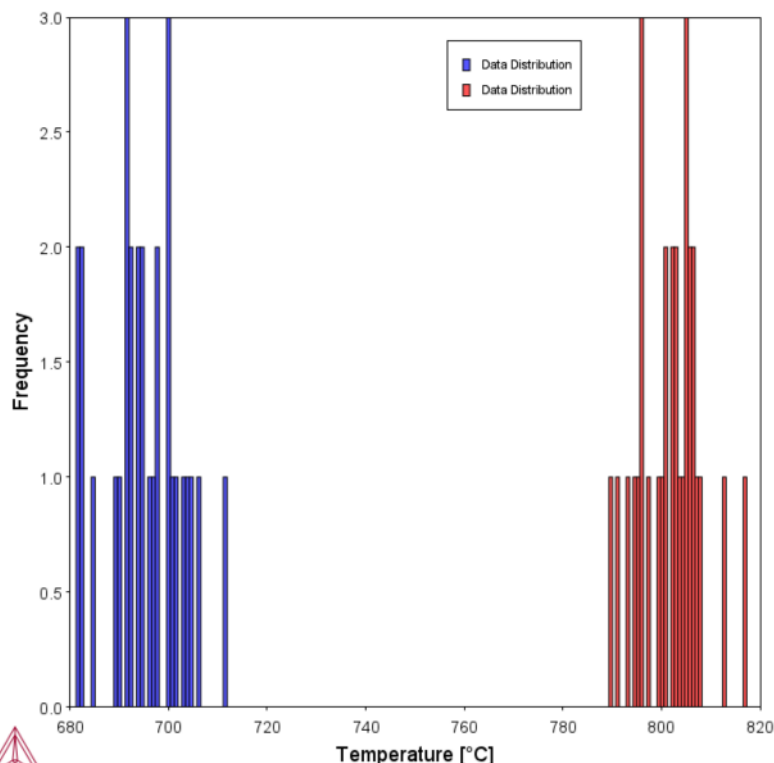


温度とマルテンサイト率の関係と実験
の比較

Mnの含有量と各マルテンサイトの
Ms温度の関係と実験の比較

臨界変態温度

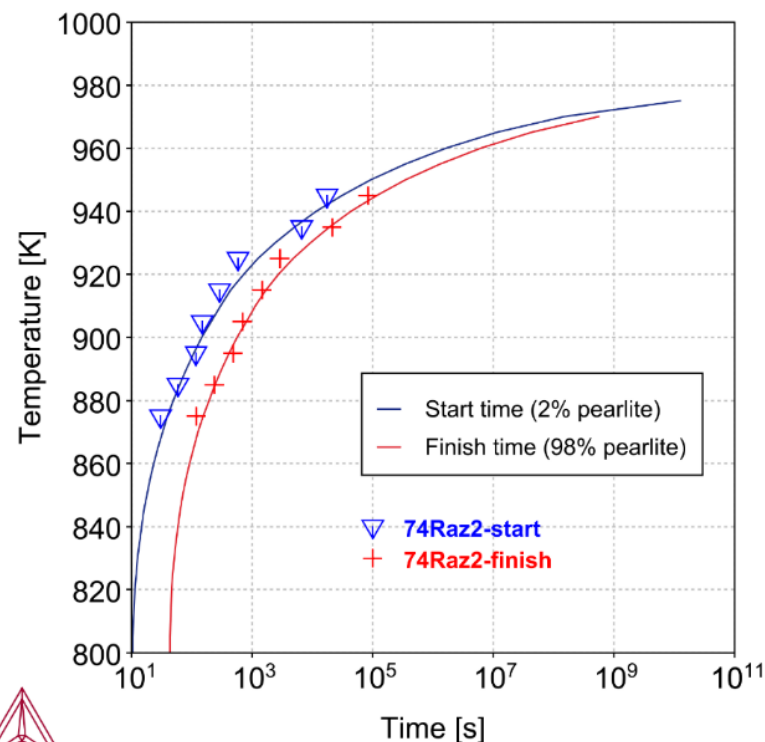
- 液相線/固相線温度
- A0～A4変態温度



低合金鋼の組成仕様範囲内における
A1, A3変態点の分布

パーライト

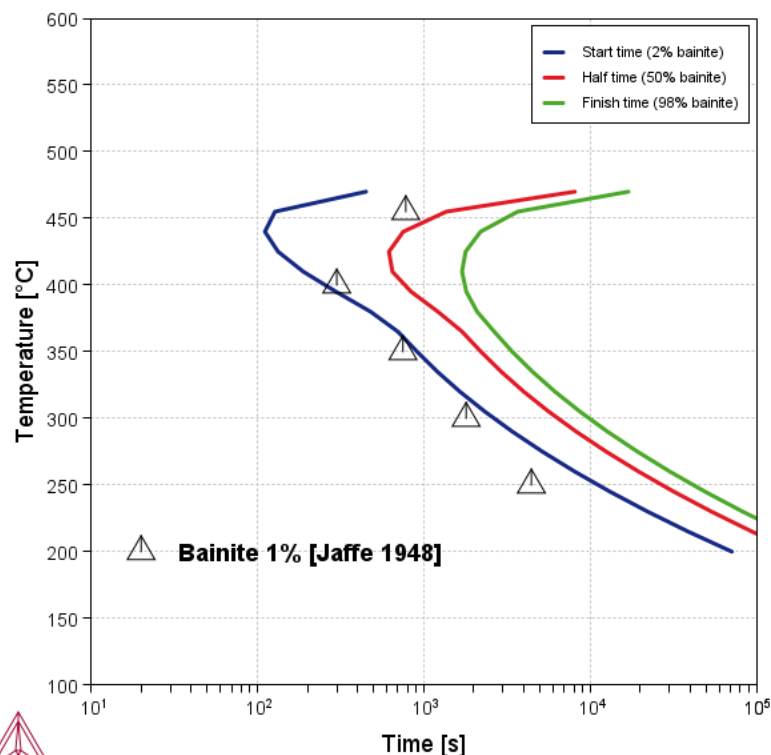
- 変態開始/終了 (TTT線図)
- 成長速度
- ラメラ間隔



パーライト変態開始、終了時間の
TTT線図と実験の比較

ベイナイト

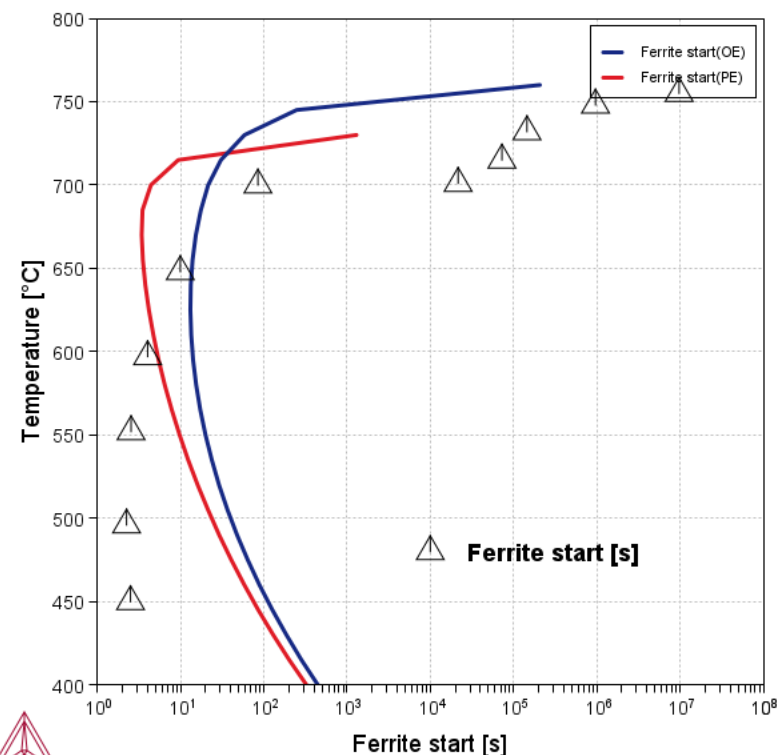
- 変態開始/終了 (TTT線図)
- セメントナイト分率
- 残留オーステナイト



Fe-0.97C-0.72Mn-0.32Si-1.54Ni-
0.8Cr-0.26MoのベイナイトのTTT

フェライト

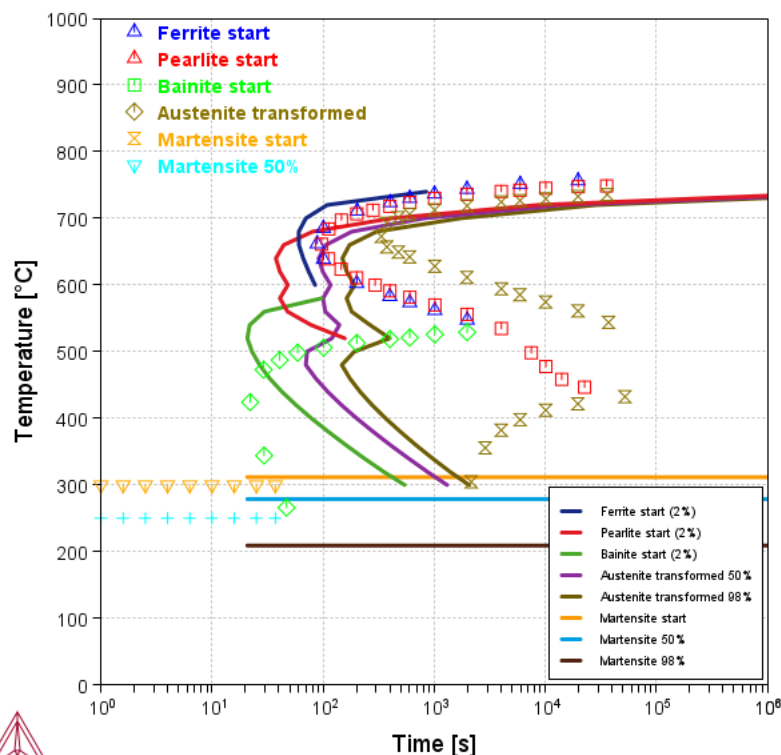
- 変態開始/終了 (TTT線図)
- パラ平衡の成長モード
- 放物線速度係数



Fe-0.12C-3.28Niのフェライト
のTTT

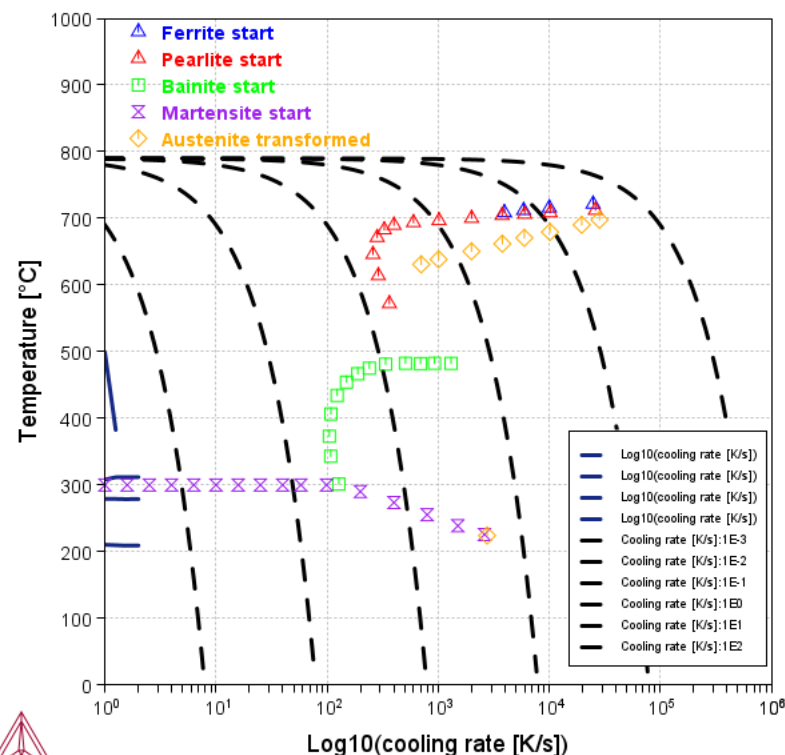
TTT

- フェライト, パーライト, バイナイト, オーステナイト (2%, 50%, 98%), マルテンサイトの等温変態曲線



CCT

- フェライト, パーライト, バイナイト, オーステナイト, マルテンサイトの連続冷却変態曲線

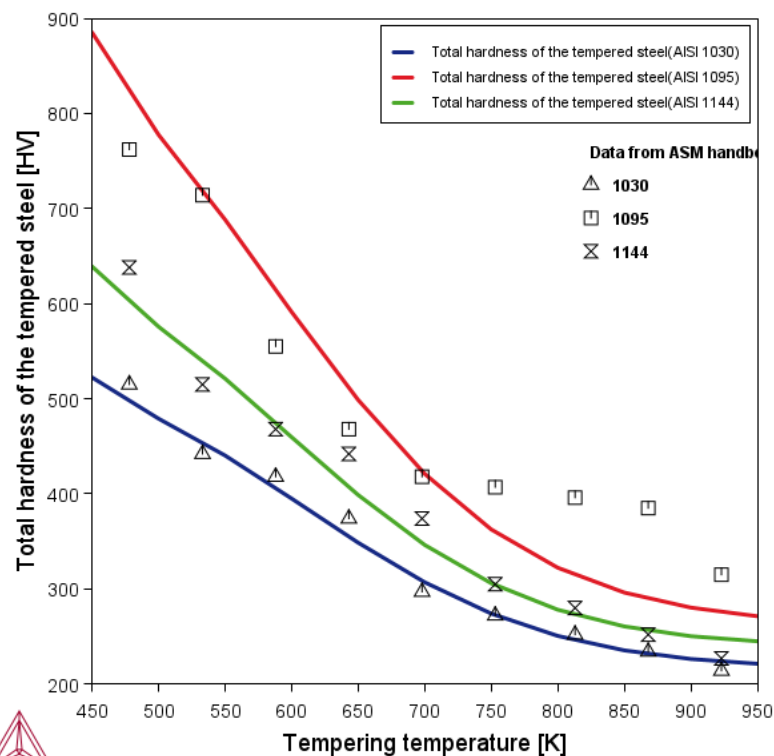


粒径53 μ mのFe-0.48C-0.86Mn-0.25Si-0.18Ni-0.98Cr-0.04MoのTTT線図

Fe-C-Mn-Si-Cr-V合金のCCT線図

マルテンサイト鋼強度

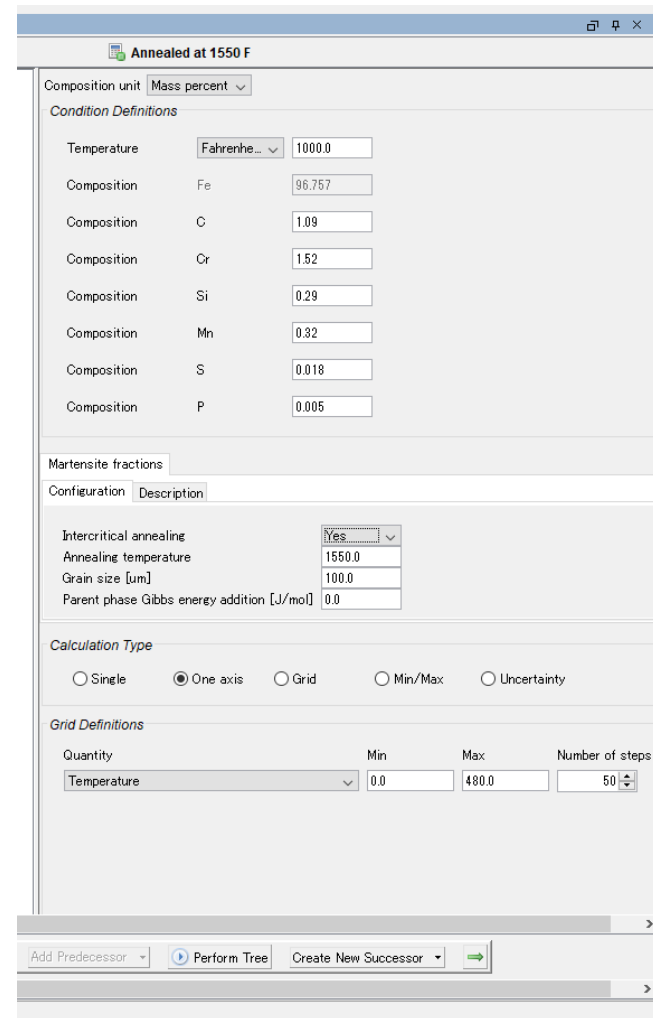
- マルテンサイト鋼の強度/硬度を計算
- 固有強度, 固溶強化, マルテンサイト形成に伴う追加強度を考慮



焼戻し温度に対する鋼材1030, 1095, 1144の硬度

マルテンサイト分率モデル

- Huyan^{*1}らにより導出された解析式に基づき計算
- 最初に形成するマルテンサイトが唯一の組織形態であると仮定
(第2, 3の異なる組織形状は出ない)
- インプット :
 - 合金組成
 - 二相域焼鈍温度
- *考慮する場合、指定温度で平衡計算を行い、マルテンサイト温度計算にはオーステナイト相の組成を用いる
 - オーステナイト相の粒径 (デフォルト: 100 μ m)
- アウトプット :
 - マルテンサイトの割合
 - オーステナイトの割合



The screenshot shows the CTC software interface for calculating martensite fractions. The window is titled "Annealed at 1550 F".

Condition Definitions

Property	Value
Temperature	1000.0 (Fahrenheit)
Composition Fe	96.757
Composition C	1.09
Composition Cr	1.52
Composition Si	0.29
Composition Mn	0.32
Composition S	0.018
Composition P	0.005

Martensite fractions

Configuration

Property	Value
Intercritical annealing	Yes
Annealing temperature	1550.0
Grain size [μ m]	100.0
Parent phase Gibbs energy addition [J/mol]	0.0

Calculation Type

Single ☐ One axis ☒ Grid ☐ Min/Max ☐ Uncertainty ☐

Grid Definitions

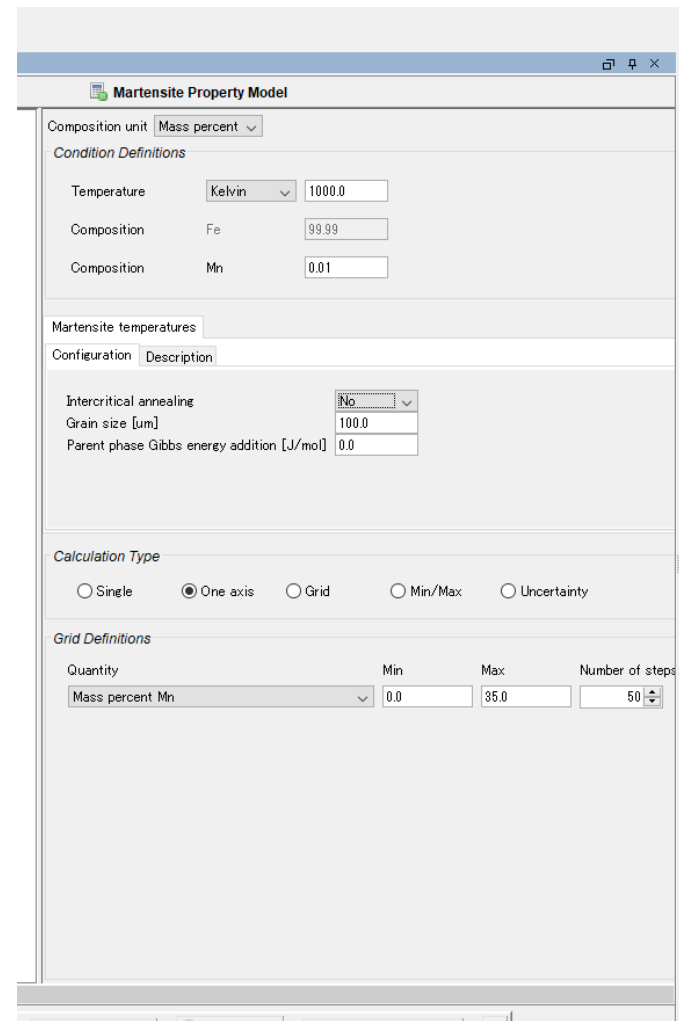
Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	0.0	480.0	50

Buttons at the bottom: Add Predecessor, Perform Tree, Create New Successor.

*1. F. Huyan et al., 'A Thermodynamic-Based Model to Predict the Fraction of Martensite in Steels', Met. Mater. Trans. A 47 (2016) 4404-4410.

マルテンサイト開始温度(M_s)モデル

- Stormvinter^{*2}らとGulapura^{*3}、および Thermo-Calcの内部モデルからモデリングされた解析式に基づき計算
- T0温度は熱力学データベースを用いて計算
- マルテンサイト分率はマルテンサイト分率モデルと同じアルゴリズムで計算
- インプット：
 - 合金組成
 - 二相域焼鈍温度
- アウトプット：
 - マルテンサイト開始 M_s /終了温度 M_f
 - Lath, Plate, Epsilonの形態を考慮した計算
 - 50, 90, 99(M_f)%の変態に対する温度



Quantity	Min	Max	Number of steps
Mass percent Mn	0.0	35.0	50

^{*2} A. Stormvinter, A. Borgenstam, J. Ågren, Thermodynamically Based Prediction of the Martensite Start Temperature for Commercial Steels. Metall. Mater. Trans. A. 43, 3870–3879 (2012).

^{*3} A. K. Gulapura Hanumantharaju, Master's thesis, KTH Royal Institute of Technology (2017).

パーライトモデル

- Yan*らのパーライトモデルに基づき、熱力学と速度論によるオーステナイト相からパーライト形成を計算（パーライト全体の組成がオーステナイトの組成と同じであると仮定）
- パーライト中のフェライト-セメンタイト界面形成によるエネルギー散逸, 界面移動, 溶質ドラッグ, 元素拡散が考慮
- * 既存のフェライトやカーバイド相とのパーライト成長は考慮されない

- インプット :
 - パーライト成長基準
Maximize growth rate（デフォルト設定） :
最大の成長率と最小のラメラ間隔（フェライトとセメンタイトの間の置換合金元素の分配係数が最大となるように）
or Maximize Gibbs energy dissipation rate

The screenshot shows the '74Raz2' software interface with the following settings:

- Composition unit:** Mass percent
- Condition Definitions:**
 - Temperature: Kelvin, 1000.0
 - Composition: Fe, 97.51
 - Composition: C, 0.69
 - Composition: Mn, 1.8
- Pearlite:**
 - Configuration: Description
 - Austenite composition from: Nominal composition
 - Pearlite criterion: Maximize growth rate
 - Pearlite mode: Optimal pearlite
 - Grain size [um]: 100.0
- Calculation Type:**
 - Single
 - ☒ One axis
 - Grid
 - Min/Max
 - Uncertainty
- Grid Definitions:**

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	800.0	1000.0	40

* J.-Y. Yan, J. Ågren, J. Jeppsson, Pearlite in Multicomponent Steels: Phenomenological Steady-State Modeling. Metall. Mater. Trans. A. 51, 1978–2001 (2020).

パーライトモデル

- インプット :
 - パーライトモード
 - Optimal pearlite（デフォルト設定） :
フェライトとセメンタイト間の置換型元素分配は、2つの相の間の炭素の平衡を維持しながら、最適化
 - or Para-pearlite
- アウトプット :
 - 成長率
 - ラメラ間隔
 - パーライト中のセメンタイト分率
 - パーライト形成の駆動力
 - パーライト形成開始（2%）
 - 50% パーライト
 - パーライト形成終了（98%）

74Raz2

Composition unit: Mass percent

Condition Definitions

Temperature	Kelvin	1000.0
Composition	Fe	97.51
Composition	C	0.69
Composition	Mn	1.8

Pearlite

Configuration | Description

Austenite composition from	Nominal composition
Pearlite criterion	Maximize growth rate
Pearlite mode	Optimal pearlite
Grain size [um]	100.0

Calculation Type

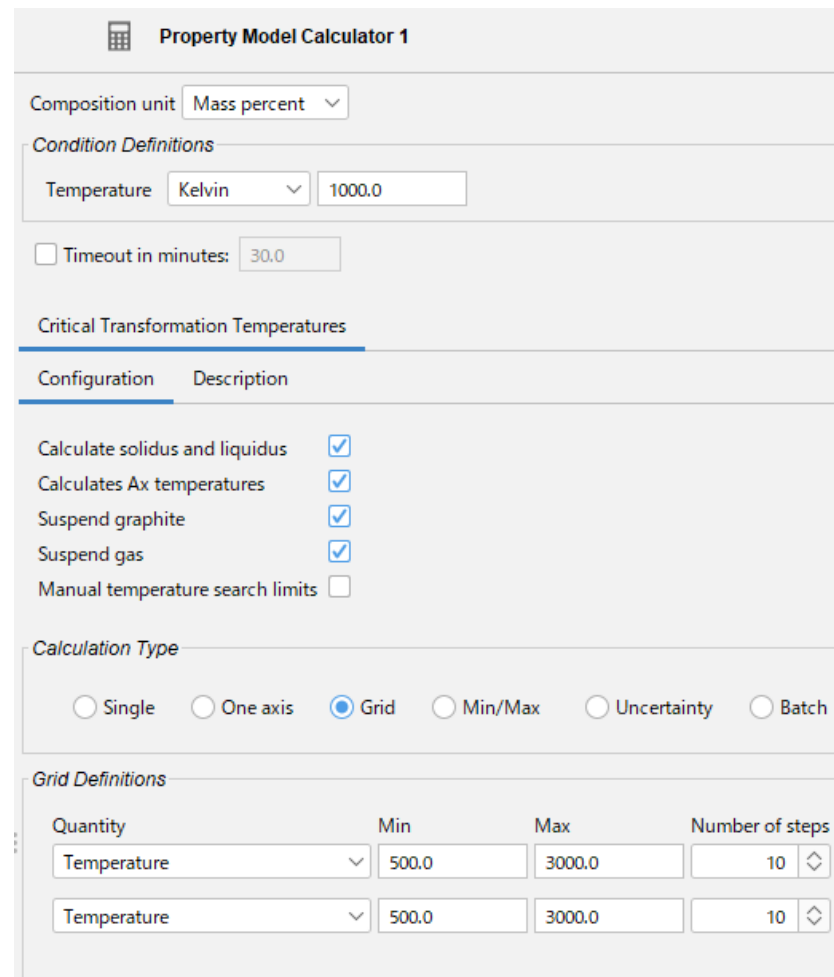
☐ Single
 ☒ One axis
 ☐ Grid
 ☐ Min/Max
 ☐ Uncertainty

Grid Definitions

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	800.0	1000.0	40

臨界変態温度モデル

- プロパティモデルと鉄鋼向けプロパティモデルで使用可能
- 平衡状態の臨界変態温度の計算が可能：
- インプット：
 - 合金組成
 - 探索温度範囲
- アウトプット：
 - 臨界変態温度
 - ✓ 固相線温度, 液相線温度
 - ✓ A_0 , A_1 , A_2 , A_3 , A_4 , A_{cm} , A_{graph}



The screenshot shows the 'Property Model Calculator 1' window. It has a 'Composition unit' dropdown set to 'Mass percent'. Under 'Condition Definitions', 'Temperature' is set to 'Kelvin' with a value of '1000.0'. There is a 'Timeout in minutes' checkbox and a value of '30.0'. A section titled 'Critical Transformation Temperatures' contains a table with two tabs: 'Configuration' and 'Description'. The 'Configuration' tab is active, showing a list of calculation options with checkboxes: 'Calculate solidus and liquidus' (checked), 'Calculates A_x temperatures' (checked), 'Suspend graphite' (checked), 'Suspend gas' (checked), and 'Manual temperature search limits' (unchecked). Below this is the 'Calculation Type' section with radio buttons for 'Single', 'One axis', 'Grid' (selected), 'Min/Max', 'Uncertainty', and 'Batch'. At the bottom is the 'Grid Definitions' section with a table for defining the calculation grid.

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	500.0	3000.0	10
Temperature	500.0	3000.0	10

ベイナイトモデル

- ベイナイト開始温度はLeachら^{*1}のモデルに基づき、パラ条件で計算される駆動力と、組成より計算されるエネルギー障壁とのつり合いから導出
- プレート伸長率はLeachら^{*2}のモデルを発展させたもので計算され、界面移動とベイナイトにおけるセメントライト形成の可能性を考慮して導出
- インプット :
 - 合金組成
 - オーステナイト化温度
 - オーステナイト相の粒径（デフォルト: 100μm）
- アウトプット :
 - ベイナイト開始温度、プレート伸長率
 - セメントライト分率、オーステナイト分率
 - ベイナイト形成開始（2%）
 - ベイナイト形成終了（98%）

The screenshot shows the 'Steel models' software interface. The 'Composition unit' is set to 'Mass percent'. Under 'Condition Definitions', 'Temperature' is 'Kelvin' at '1000.0' and 'Composition' is 'Fe' at '100.0'. A 'Timeout in minutes' of '30.0' is specified. The 'Bainite' section is active, showing 'Austenite composition from' as 'Equilibrium composition at austenitizing temperature', 'Austenitizing temperature' as '1000.0', and 'Grain size [um]' as '100.0'. The 'Calculation Type' is set to 'One axis'. The 'Grid Definitions' table shows a temperature range from 500.0 to 1100.0 with 40 steps.

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	500.0	1100.0	40

*1. L. Leach, P. Kolmskog, L. Höglund, M. Hillert, and A. Borgenstam, Metallurgical and Materials Transactions A 49, 4509–4520 (2018).

*2. L. Leach, J. Ågren, L. Höglund, and A. Borgenstam, Metallurgical and Materials Transactions A 50, 2613–2618 (2019)

フェライトモデル

- フェライトモデルは、熱力学と速度論によるオーステナイト相から初晶フェライト形成を計算
- フェライトの核生成や界面移動については、古典核生成理論*から計算され、成長については、フェライト/オーステナイト界面の易動度や溶質ドラッグを考慮した各種モデルを使用して計算
- インプット：
 - 成長モード：OE, PE, NPLE, OP, PP
 - 核生成や界面移動度に関する詳細なユーザ設定
- アウトプット：
 - 放物線速度係数
 - フェライト形成の駆動力
 - フェライトの核生成速率
 - フェライト形成開始（2%）
 - 50% フェライト
 - フェライト形成終了（98%）

The screenshot shows the 'Ferrite' configuration window in the CTC software. The 'Composition unit' is set to 'Mass percent'. Under 'Condition Definitions', 'Temperature' is set to 'Kelvin' at '1000.0'. The 'Timeout in minutes' is set to '30.0'. The 'Ferrite' section has two tabs: 'Configuration' and 'Description'. In the 'Configuration' tab, 'Austenite composition from' is set to 'Nominal composition', 'Grain size [um]' is '100.0', 'Growth mode' is 'Orthoequilibrium (OE)', 'Phase addition [J/mol]' is '0.0', 'Skip time integration' is unchecked, and 'Custom parameters' is unchecked. The 'Calculation Type' section has radio buttons for 'Single', 'One axis', 'Grid' (selected), 'Min/Max', 'Uncertainty', and 'Batch'. The 'Grid Definitions' table at the bottom has two rows, both for 'Temperature' with 'Min' at '500.0', 'Max' at '3000.0', and 'Number of steps' at '10'.

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	500.0	3000.0	10
Temperature	500.0	3000.0	10

*. W. F. Lange, M. Enomoto, H. I. Aaronson, The kinetics of ferrite nucleation at austenite grain boundaries in Fe-C alloys. Metall. Trans. A. 19, 427-440 (1988).

- 連続過程におけるフェライト、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトへの変態を計算し、連続冷却変態曲線を作成

- インプット：

- 合金組成
- オーステナイト化温度
- オーステナイト相の粒径
- 各変態に対する詳細なユーザ設定など

- アウトプット：

- フェライト, パーライト, ベイナイト, マルテンサイトの変態開始/終了時間-温度
- 変態オーステナイト (2, 10, 50, 90, 98%)
- フェライト+セメンタイト変態 2%/98%
- 処理後の相分率
 - ・フェライト ・パーライト
 - ・ベイナイト ・マルテンサイト
 - ・総フェライト ・フェライト+セメンタイト

The screenshot displays the 'TTT Diagram' software interface. At the top, the 'Composition unit' is set to 'Mass percent'. Under 'Condition Definitions', 'Temperature' is set to 'Kelvin' with a value of '1000.0', and 'Composition' is set to 'Fe' with a value of '100.0'. A 'Timeout in minutes' field is set to '30.0'. The 'TTT Diagram' section has two tabs: 'Configuration' (selected) and 'Description'. Under 'Configuration', 'Austenite composition from' is set to 'Nominal composition', 'Grain size [um]' is '100.0', and 'Calculation setting' is 'Quick'. The 'Calculation Type' section shows radio buttons for 'Single', 'One axis' (selected), 'Grid', 'Min/Max', 'Uncertainty', and 'Batch'. The 'Grid Definitions' section has a table with columns 'Quantity', 'Min', 'Max', and 'Number of steps'. The 'Temperature' row shows 'Min' as '500.0', 'Max' as '1100.0', and 'Number of steps' as '40'.

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature	500.0	1100.0	40

- 連続冷却過程におけるフェライト、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトへの変態を計算し、等温変態線曲線を作成
- インプット：
 - 合金組成
 - オーステナイト化温度
 - オーステナイト相の粒径
 - 開始温度, 終了温度
 - 各変態に対する詳細なユーザ設定など
- アウトプット：
 - フェライト, パーライト, ベイナイト, マルテンサイトの変態開始/終了時間-温度
 - 変態オーステナイト (2, 10, 50, 90, 98%)
 - フェライト+セメンタイト変態 2%/98%
 - 処理後の相分率
 - フェライト • パーライト
 - ベイナイト • マルテンサイト
 - 総フェライト • フェライト+セメンタイト

The screenshot shows the CTC software interface for CCT diagram calculation. The interface is divided into several sections:

- Composition unit:** Mass percent (dropdown)
- Condition Definitions:**
 - Temperature: Kelvin (dropdown), 1000.0 (input)
 - Composition: Fe (dropdown), 100.0 (input)
 - Timeout in minutes: 30.0 (input)
- CCT Diagram:**
 - Configuration:**
 - Austenite composition from: Nominal composition (dropdown)
 - Grain size [um]: 100.0 (input)
 - Start temperature: 1000.0 (input)
 - End temperature: 500.0 (input)
 - Log10(cooling rate [K/s]): 0.0 (input)
 - Calculation setting: Quick (dropdown)
 - Calculation Type:**
 - Single (radio button)
 - One axis (radio button, selected)
 - Grid (radio button)
 - Min/Max (radio button)
 - Uncertainty (radio button)
 - Batch (radio button)
 - Grid Definitions:**

Quantity	Min	Max	Number of steps
Temperature (dropdown)	500.0 (input)	1100.0 (input)	40 (input)