



Challenging Tomorrow's Changes

合金組織予測ソフトウェア MICRESSの紹介と解析事例

MICRESS



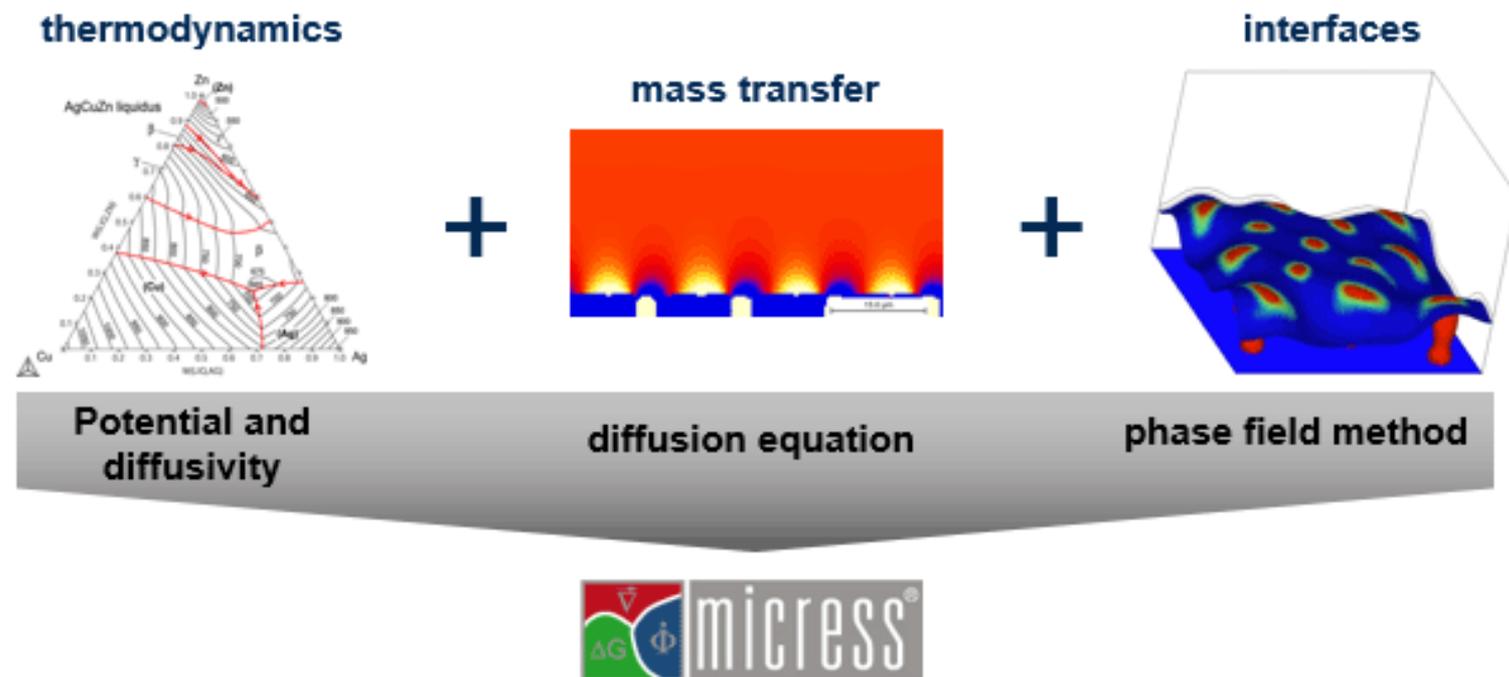
合金組織形成計算ソフトウェア

概要

計算例

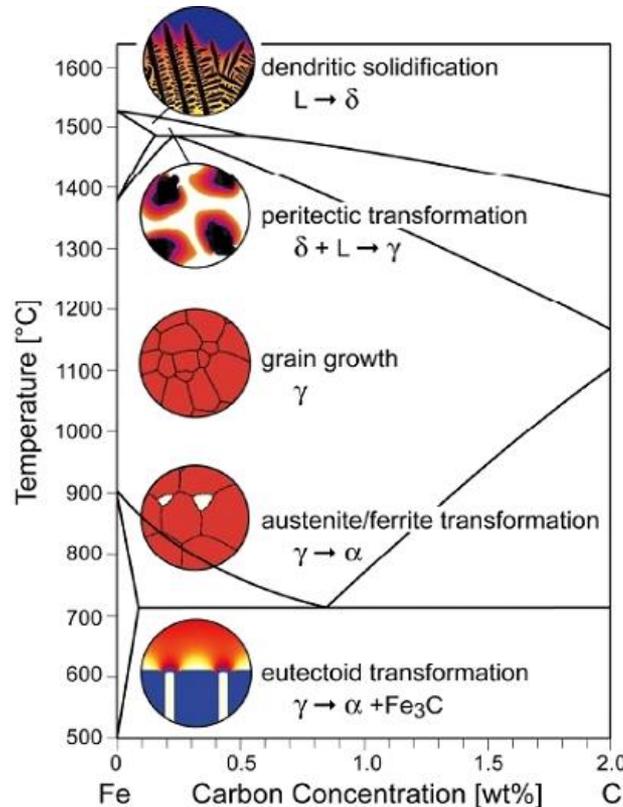
- 球状黒鉛鋳鉄の3D解析
- Zn合金の組織および硬度予測
- その他

熱力学データと連携して、合金の組織を予測する



Thermo-Calc熱力学データと連携して、温度履歴や組成、濃度や結晶粒分布に応じた多様な合金組織のミクロ組織形成過程を解析するソフトウェア

➤ Fe-C系の各反応の組織変化の一貫計算



- ◆ 凝固 ($L \rightarrow \delta$)
- ◆ 包晶反応 ($L + \delta \rightarrow \gamma$)
- ◆ 結晶粒成長
- ◆ $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態
- ◆ 共析反応 ($\gamma \rightarrow \alpha + \text{Fe}_3\text{C}$)

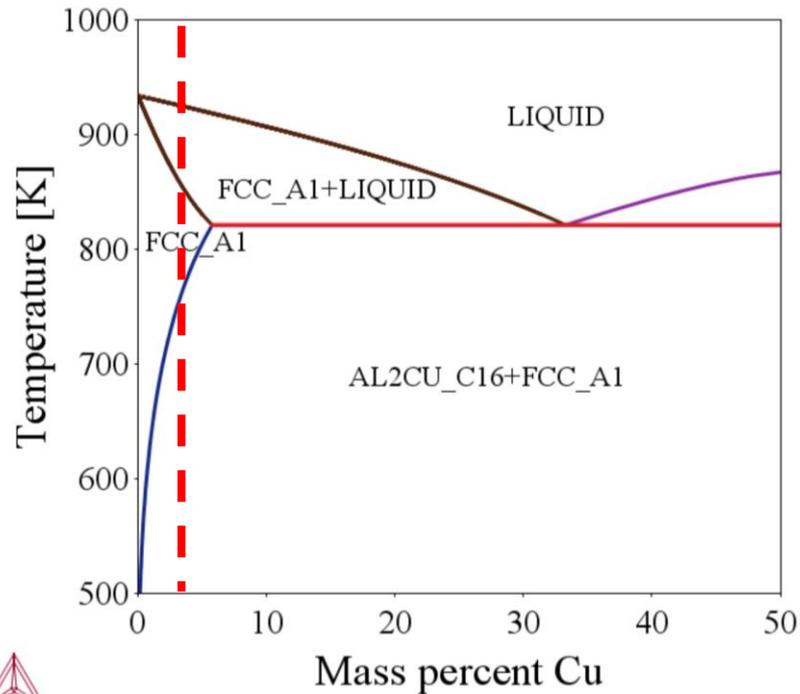
組成：Al-3Cu (at.%)

初期温度：950 K

状態図

TCAL6 : Al, Cu

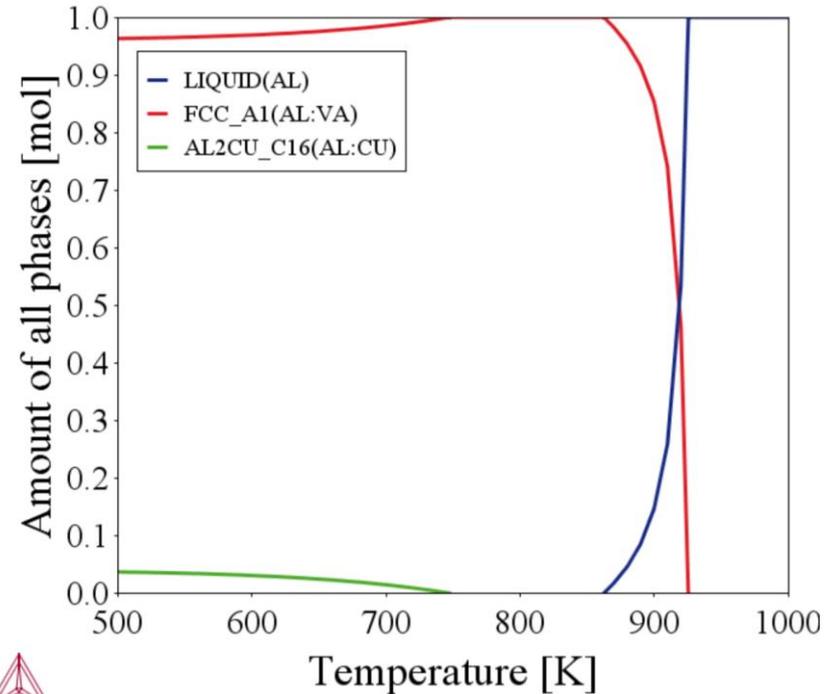
Pressure [Pa] = 100000.0, System size [mol] = 1.0



平衡相分率 - 温度

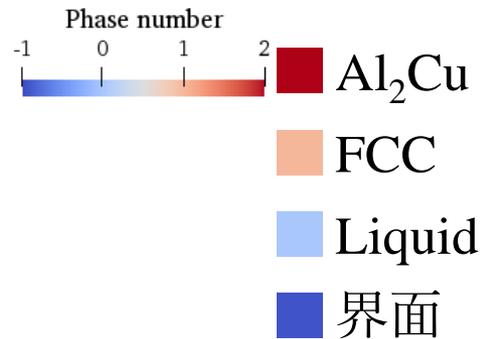
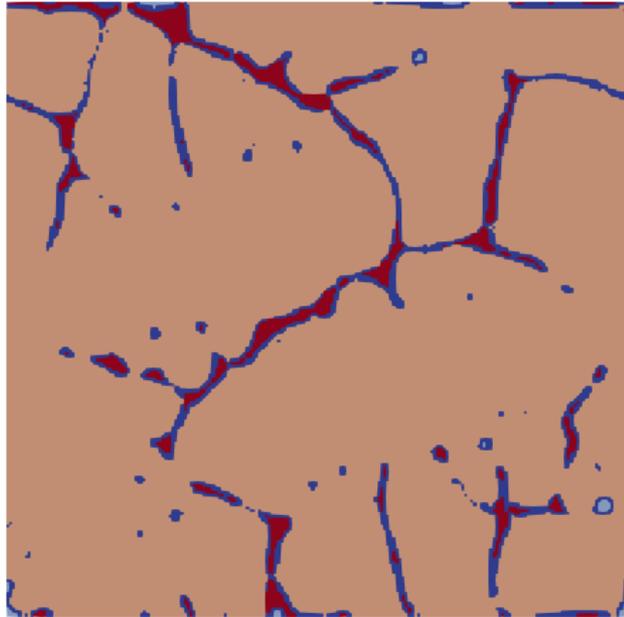
TCAL6 : Al, Cu

Pressure [Pa] = 100000.0, System size [mol] = 1.0, Mass percent Cu = 3.0

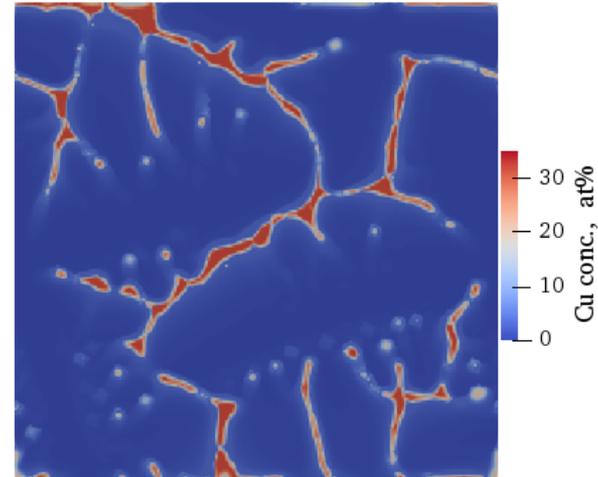


- 初期組成： Al-3Cu (at.%)
- 初期相： 液相のみ
- 計算領域
 - 格子数： 200×200 or $200 \times 200 \times 200$
 - 格子幅： $0.5 \mu\text{m}$ ($100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$)
- 温度条件： 初期温度を950 K。一次元の温度場を設定。
- 異方性： デンドライト性異方性をFCCに設定
- 核生成条件： 不均一核生成としてFCCと Al_2Cu 相を設定
- 熱力学データベース： TCAL6 (駆動力計算、核生成判定用)
- 動力学データベース： MOBAL5 (拡散係数算出用)

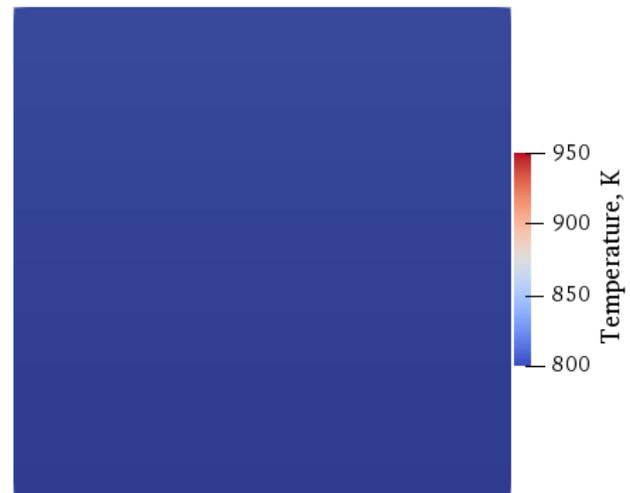
Time: 0.50 s
相番号



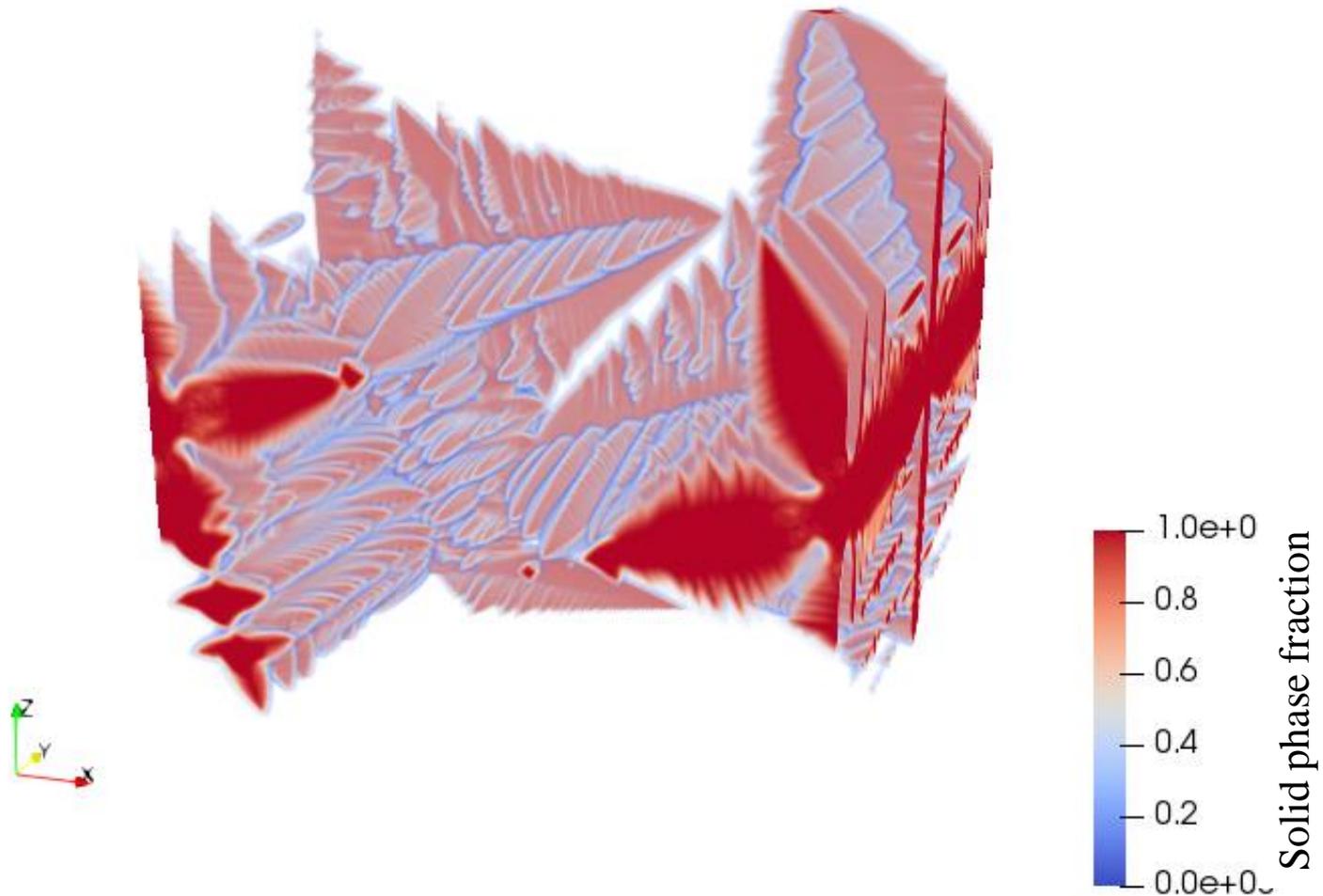
Cu濃度



温度

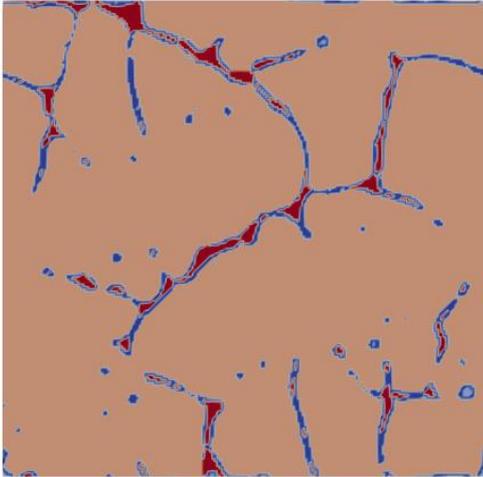


Time: 0.07 s

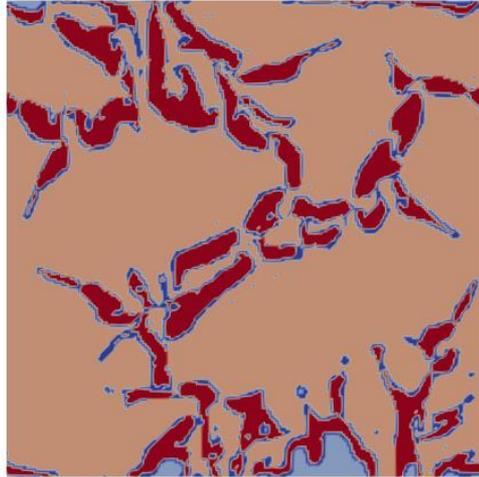


Time: 0.50

Al-3Cu



Al-9Cu



Al-15Cu



-  Al₂Cu
-  FCC
-  Liquid
-  界面

C. Kumara, et al., Materialia 13(2020) 100862.

- 脆性を有するため機械的特性を低下
- 低融点のLaves相が長鎖状に形成されることで液化割れの原因
- Laves相の形成条件には冷却速度以外に、界面移動速度や温度勾配、過冷却条件などがなど起因する

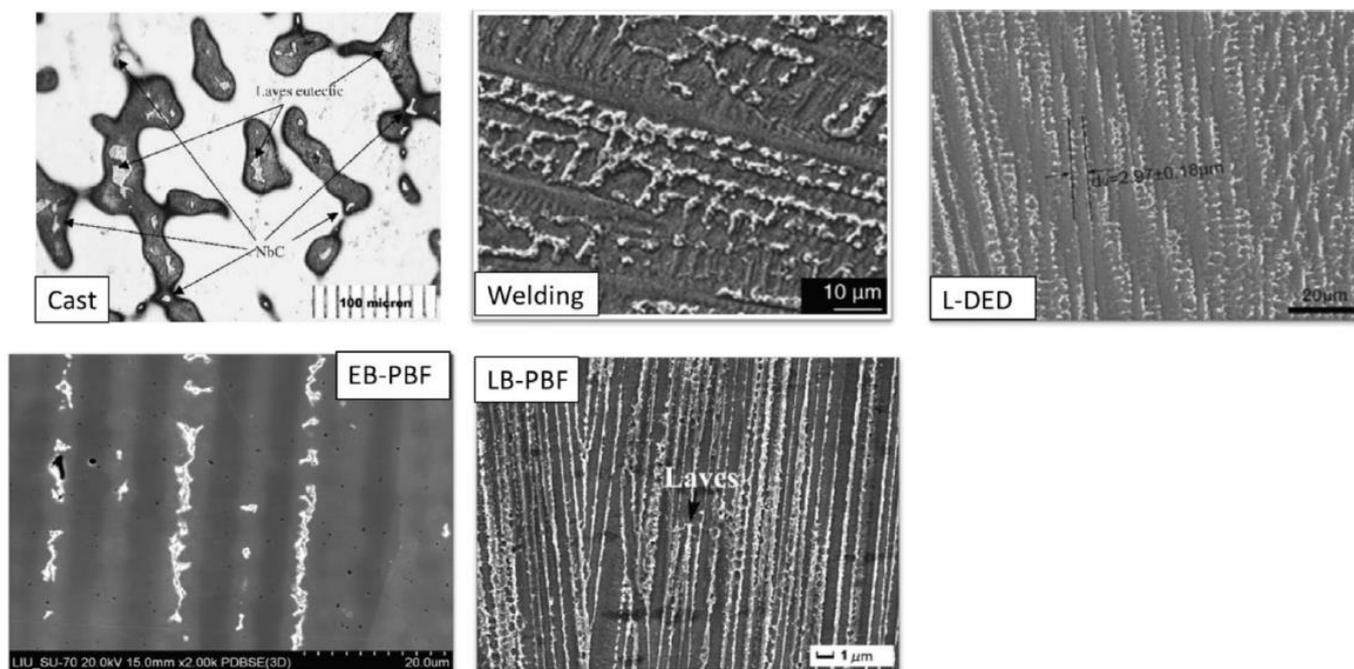


Fig. 2. Microstructures obtained from different process, exhibiting the formed Laves + NbC (white precipitates) at the end of non-equilibrium solidification. In L-DED, EB-PBF, and LB-PBF, the build direction is from bottom to top.

Source: Sources: cast [12], welding [27], L-DED [15], EB-PBF [14] and LB-PBF [28].

C. Kumara, et al., Materialia 13(2020) 100862.

MICRESSを用いることで、対象とする合金組成、プロセスの条件のもと組織形成過程や元素拡散挙動の解析が可能

Laves相のMICRESS計算と実験観察結果の比較

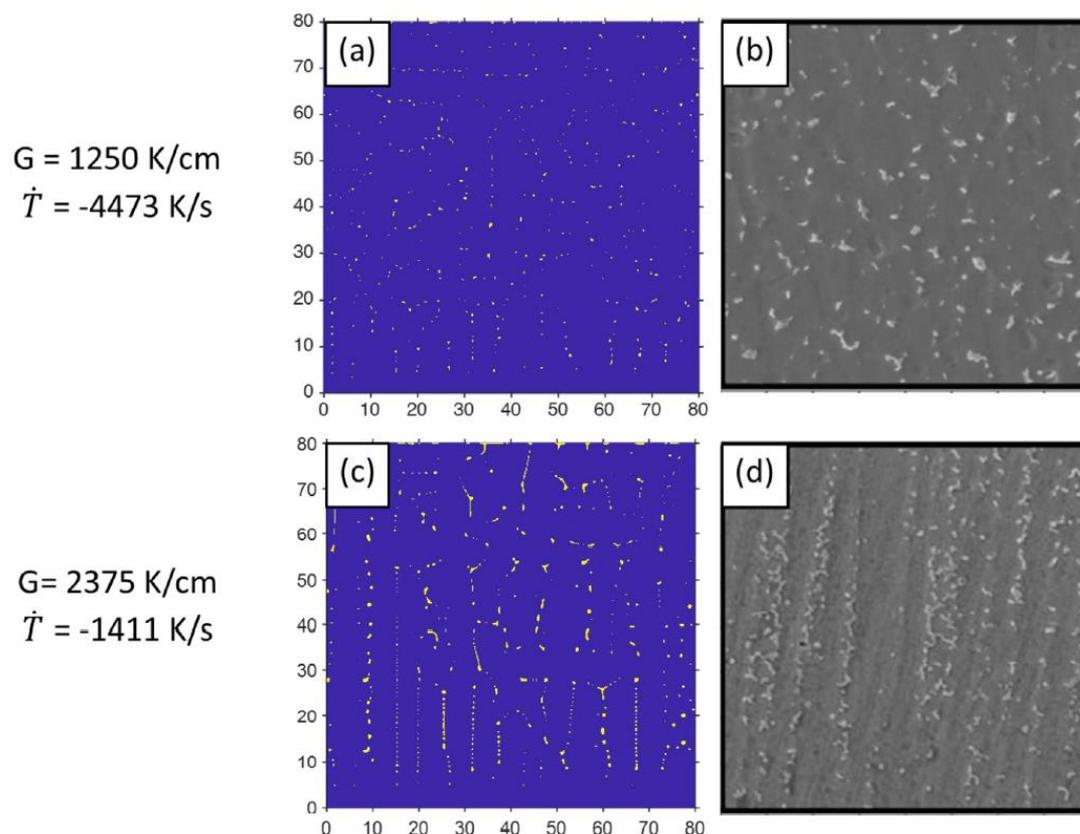


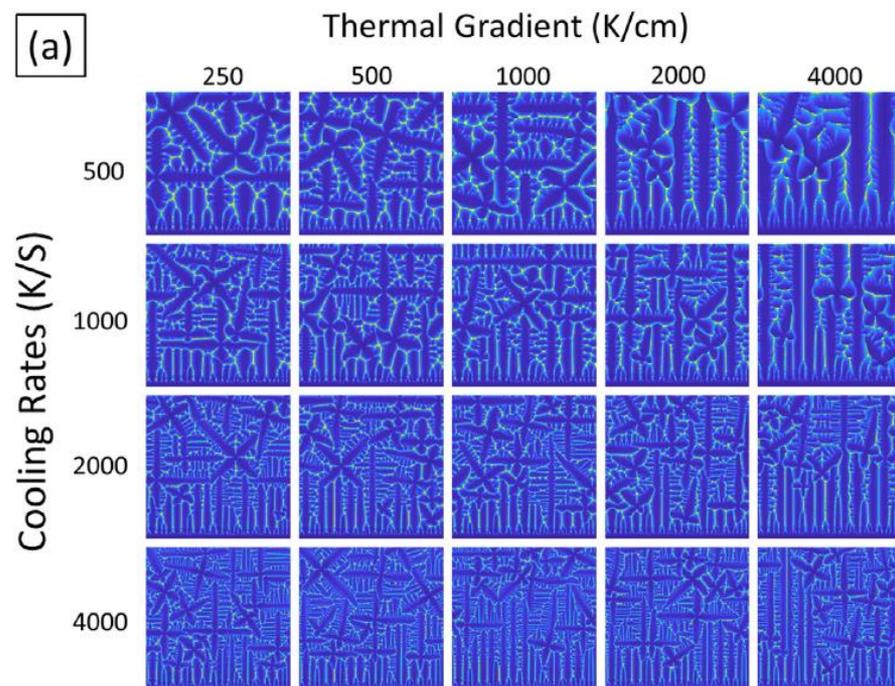
Fig. A1. (a), (c) Predicted morphology of the Laves phase at two different thermal conditions and (b), (d) respective experimentally observed Laves phase morphology in the microstructure (size $80\mu\text{m} \times 80\mu\text{m}$).

Thermal conditions and the experimentally observed microstructures were taken from Nie et al. [30].

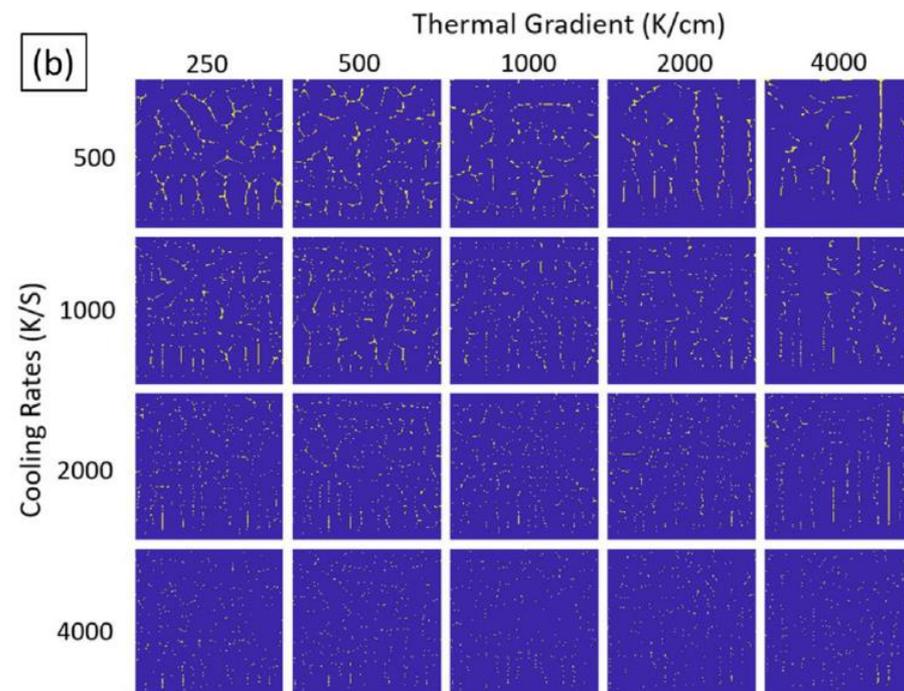
C. Kumara, et al., Materialia 13(2020) 100862.

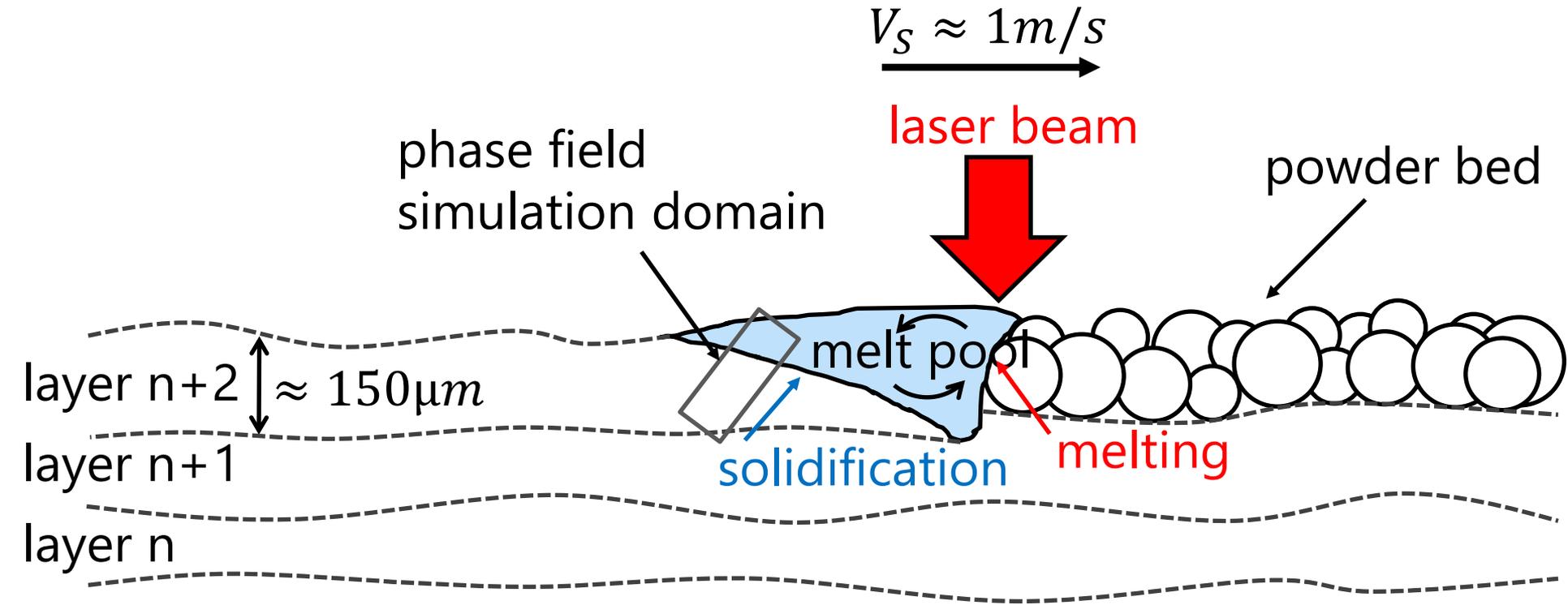
- **冷却速度が遅い**とデンドライト形態が粗大でLaves相も粗く長鎖状
- **冷却速度が速い**とデンドライト形態は微細となり、
一次、二次デンドライトアームの厚さ・間隔は小さくなる
最終的にLaves相は微細で離散的に生成
→細長い連続的なLaves相とならず、液化割れが抑制

デンドライト構造



Laves相の分布





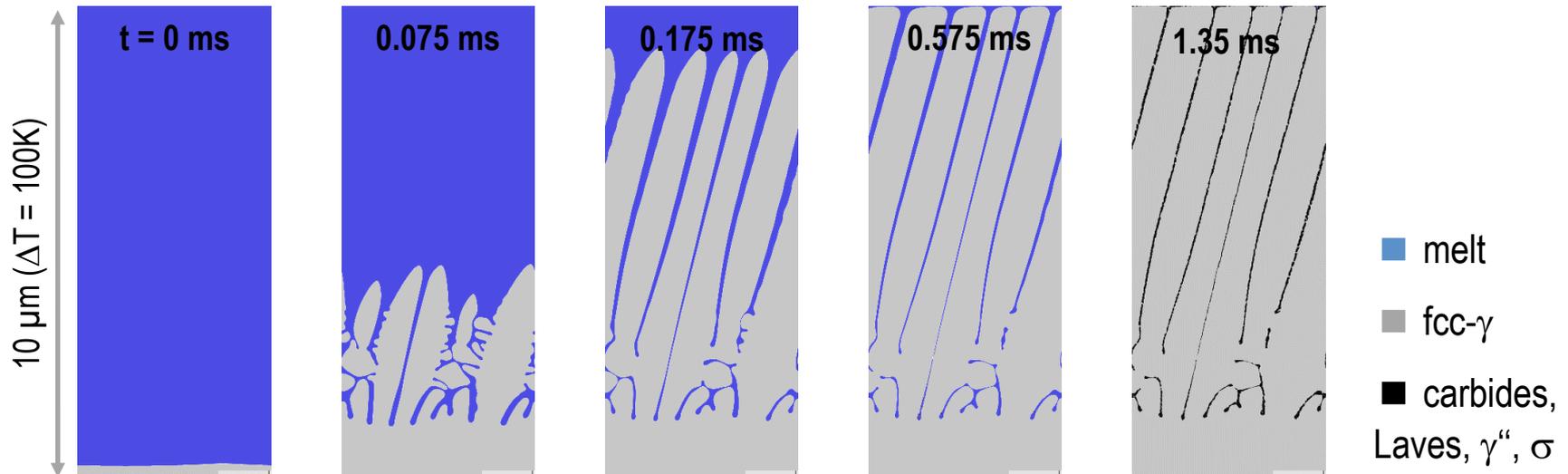
from finite elements calculations $\rightarrow V_g \approx 5 \dots 25\ \text{cm/s}$, $G \approx 10^5\ \text{K/cm}$

Composition (wt%):

Ni +	Cr	Mo	Ti	Al	Co	Fe	Nb	C
Alloy 718(EOS)	19.0	3.05	0.9	0.5	0.5	17.64	5.13	0.08

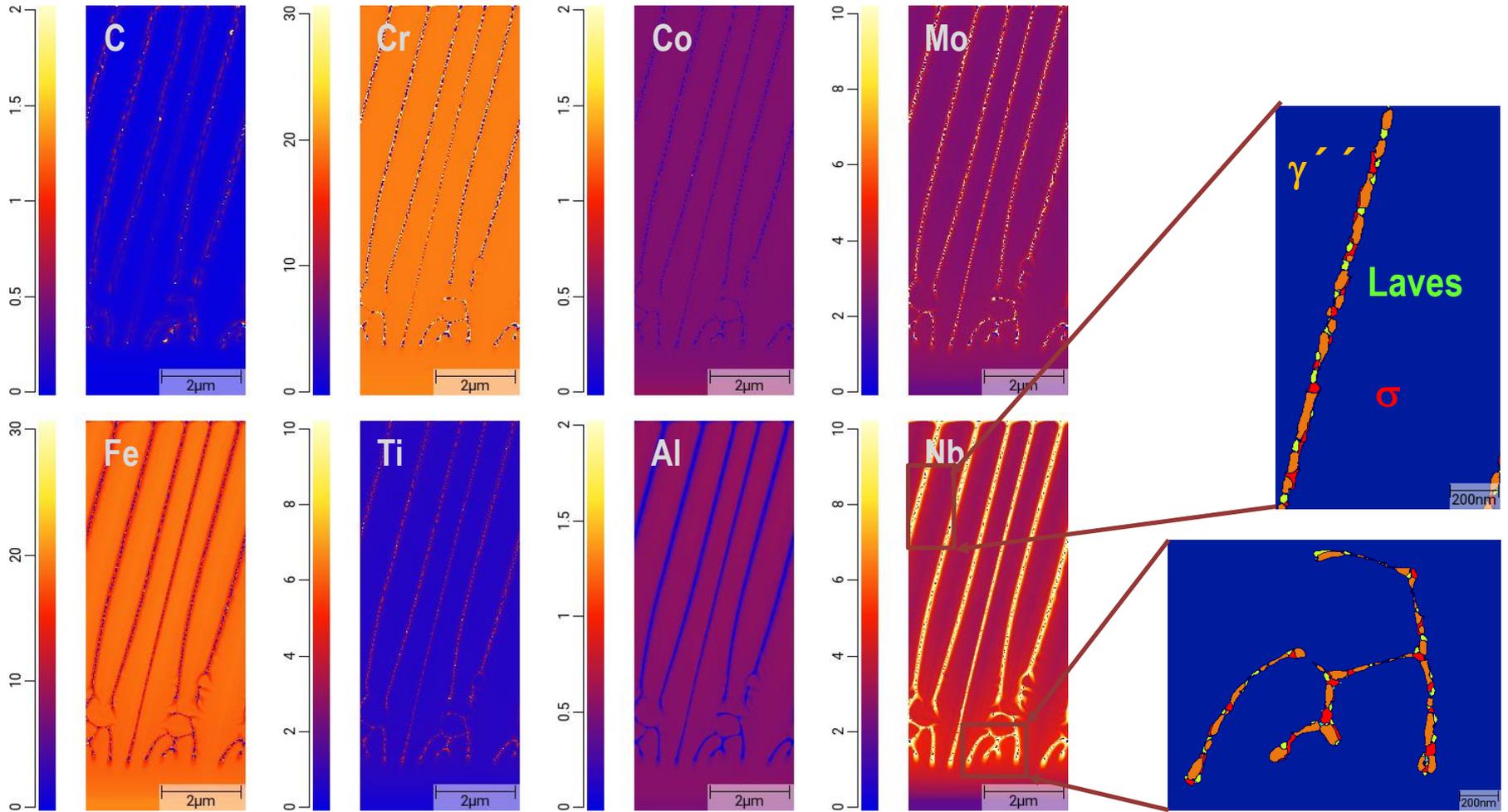
phases: melt, fcc- γ , fcc-carbides, Laves, γ'' , σ -phase

thermal conditions: cooling rate $4 \cdot 10^5$ K/s, temperature gradient 10^5 K/cm, both constant ($\rightarrow v_{iso} = 4$ cm/s)





thermal conditions: cooling rate $4 \cdot 10^5$ K/s, temperature gradient 10^5 K/cm, both constant ($\rightarrow v_{\text{iso}} = 4\text{cm/s}$)



MICRESS



合金組織形成計算ソフトウェア

概要

計算例

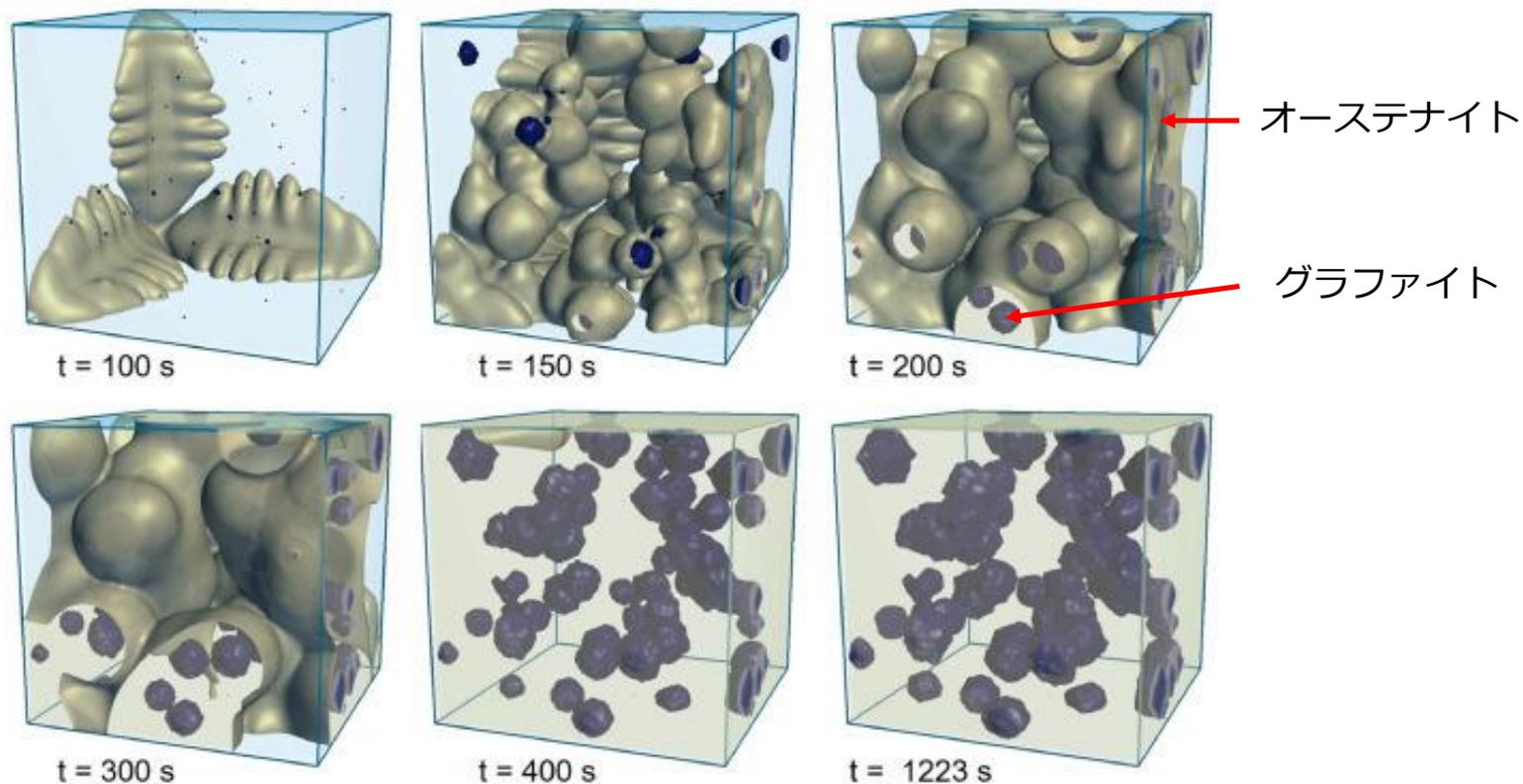
- **球状黒鉛鑄鉄の3D解析**
- Zn合金の組織および硬度予測
- その他

* J. Eiken, E. Subasic, J Lacaze, *Materialia* 9, 100538, 2020.

**J. Eiken, B. Böttger, *Trans Indian Inst Met* 71, 2725–2729, 2018.

体積膨張を考慮したVol-MMPF**モデルにより、鑄造過程における球状黒鉛鑄鉄の微小偏析の3次元フェーズフィールド計算を実施

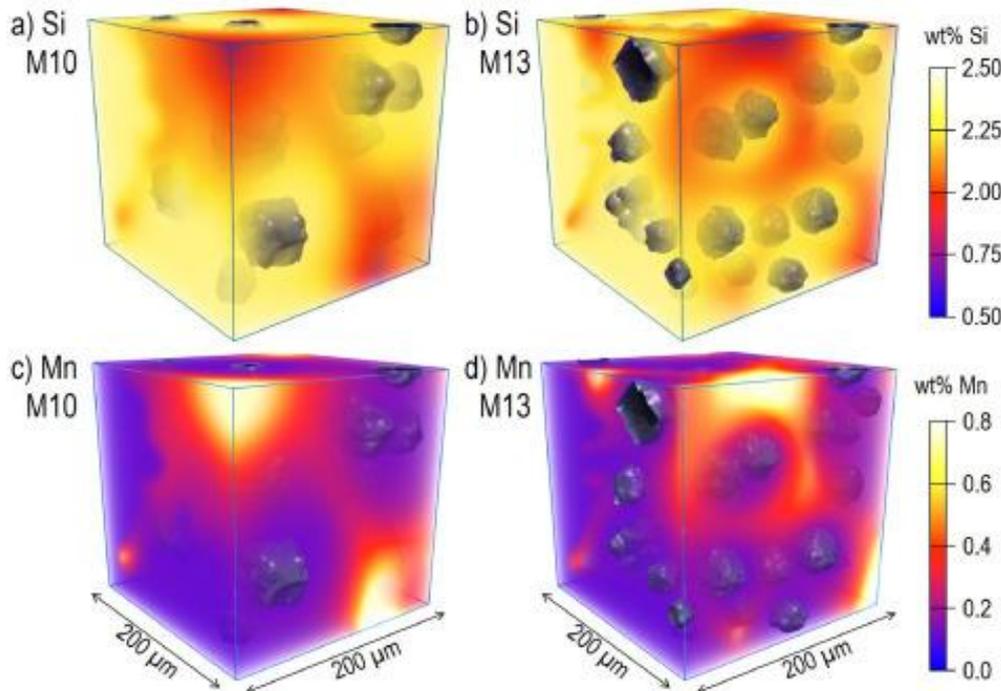
Fe-3.66C-1.97Si-0.18Mn-0.048Mg[wt.%]合金の微細構造変化の計算結果
(1230°Cから752°Cまで冷却)



* J. Eiken, E. Subasic, J Lacaze, *Materialia* 9, 100538, 2020.

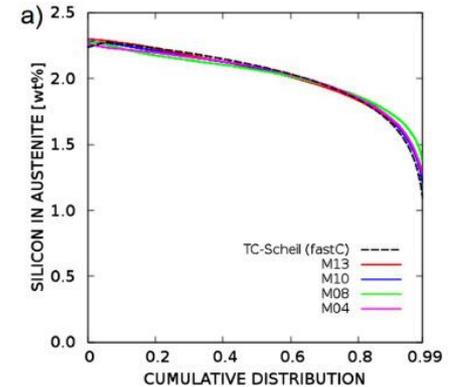
シミュレーションを用いて、冷却速度と球状黒鉛の密度のそれぞれが微小偏析に及ぼす影響を調査した。

SiとMnの濃度分布
(M10:密度低、M13:密度高)

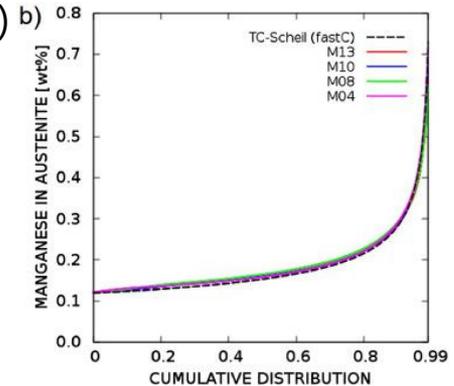


1次元プロファイル(各元素の累積分布)

Si (降順)



Mn (昇順)

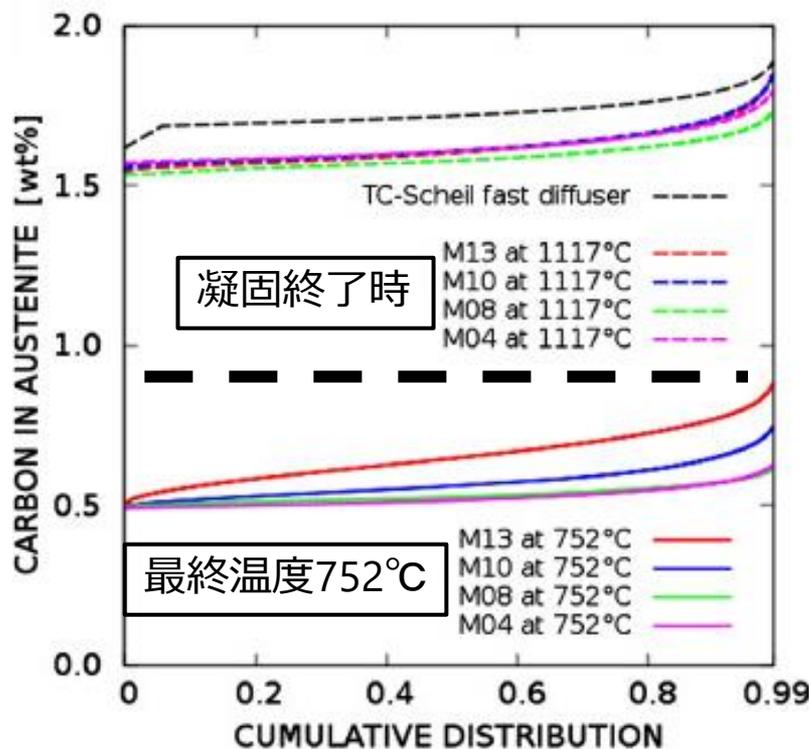


- 最終凝固領域でグラファイト安定化剤のSiが最も少なく、炭化物安定化剤のMnが最も多い。
- 1Dプロファイルではこれら置換型元素の分布はいずれの条件でも同様の結果となった。
- 系全体の統計的な解析はTCでも可能だが、複雑な3D分布や勾配の局所的な解析と評価にはMICRESSが貢献する

* J. Eiken, E. Subasic, J Lacaze, *Materialia* 9, 100538, 2020.

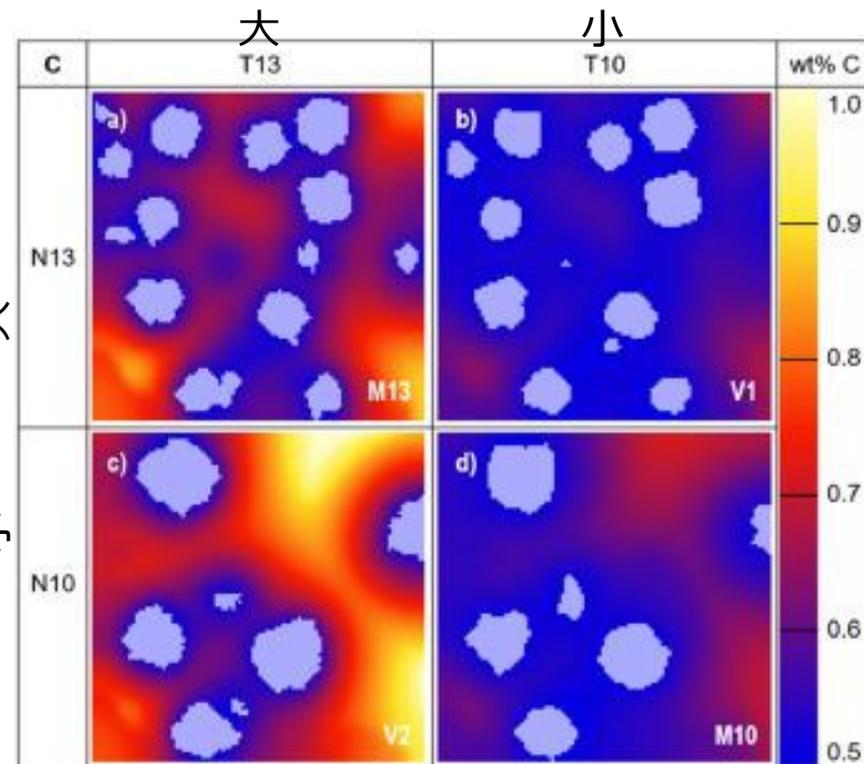
シミュレーションを用いて、冷却速度と球状黒鉛の密度のそれぞれが微小偏析に及ぼす影響を調査した。

1次元プロファイル(各元素の累積分布)



炭素濃度分布

冷却速度



- 冷却速度が小さい場合、濃度分布は均一化されて最大濃度は低下する。
- 黒鉛の密度が小さい場合、拡散距離が長くなり最大濃度が高くなる。

MICRESS



合金組織形成計算ソフトウェア

概要

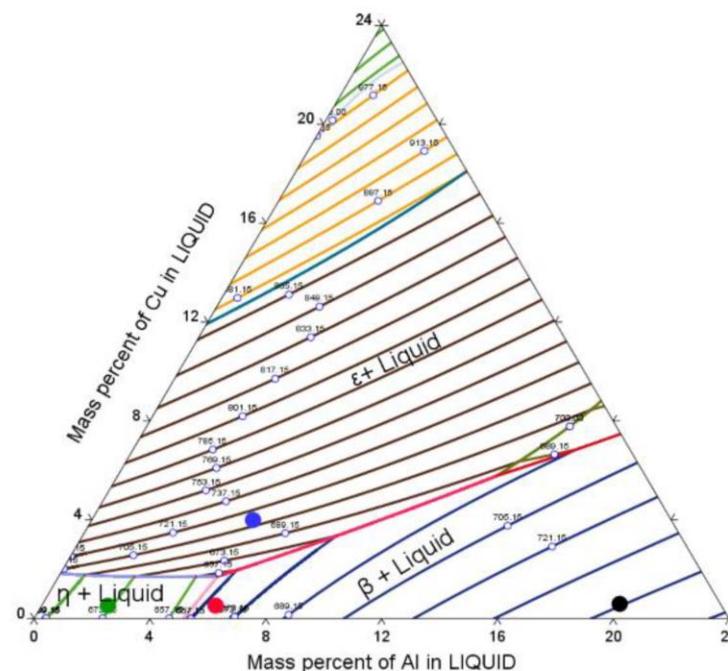
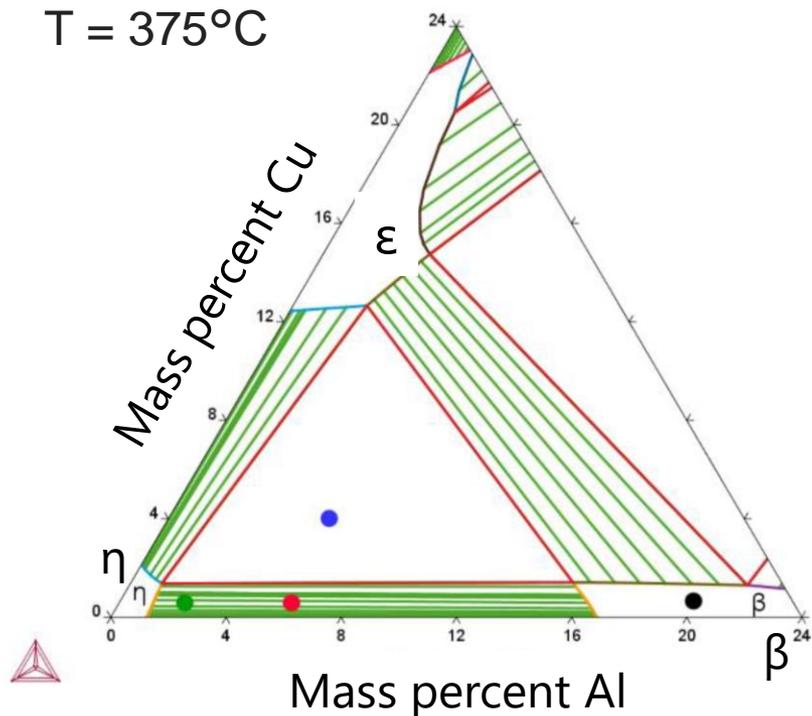
計算例

- PBF-LB
- 球状黒鉛鋳鉄の3D解析
- **Zn合金の組織および硬度予測**
- その他

* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

Zn-xAl-xCu合金系について、鑄造時の微細組織を予測するとともに、Cu濃度と相分率をもとに硬度を推定することで、軸受に最適な合金を探索

等温断面図
T = 375°C

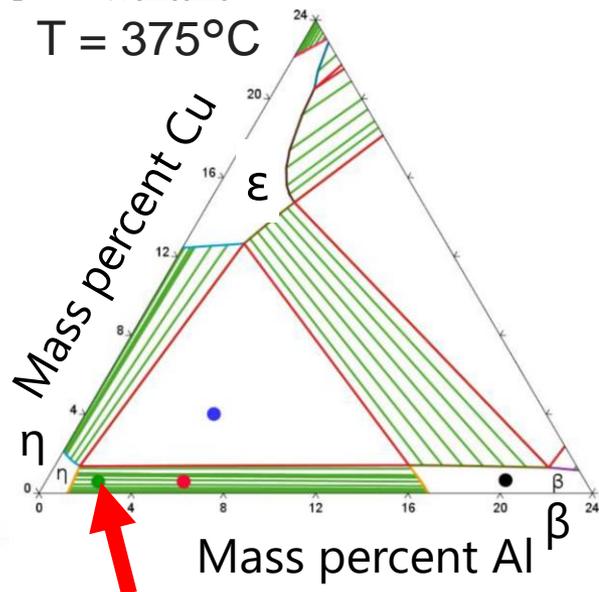


* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

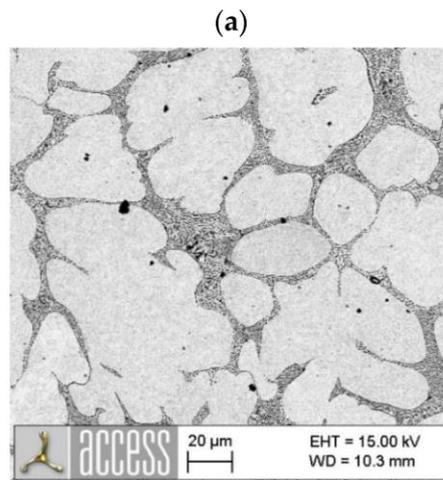
Zn-2Al-0.7Cu合金

等温断面図

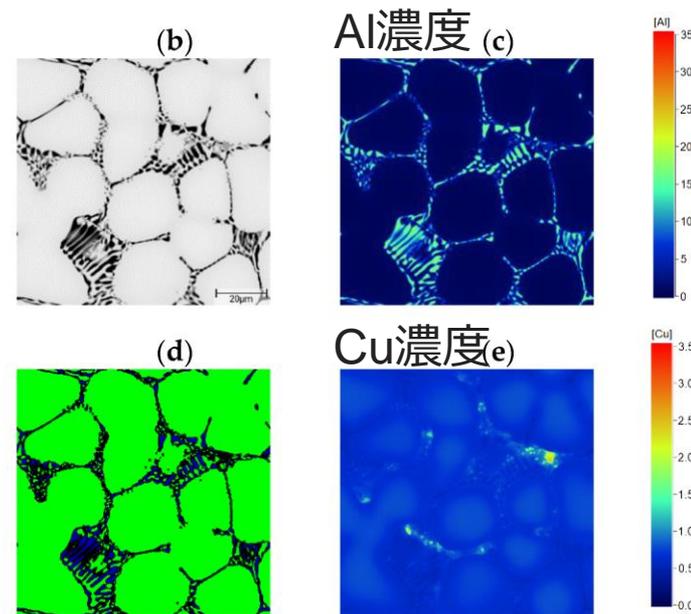
T = 375°C



SEM画像



凝固計算結果



緑:η、青:β

相分割はη相 92% とβ相 8% となった。

平衡計算で算出されるβ相の割合6.1%に近く、凝固は平衡に近い状態と示唆される。

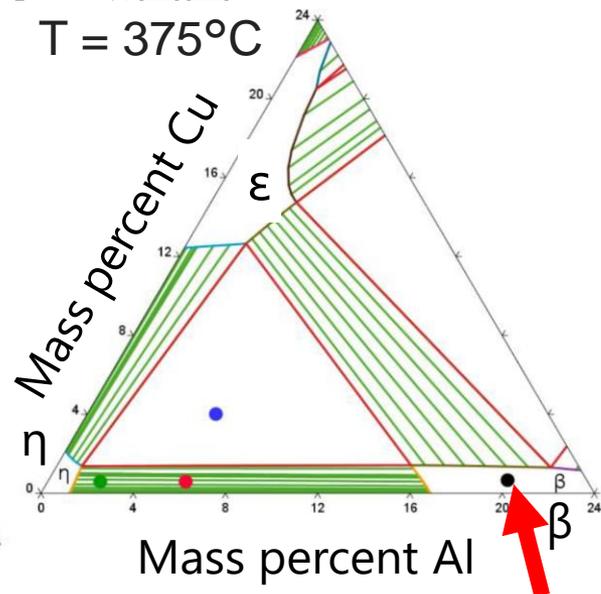
Cuは最後に凝固する共晶セル間の境界部分に蓄積した。

* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

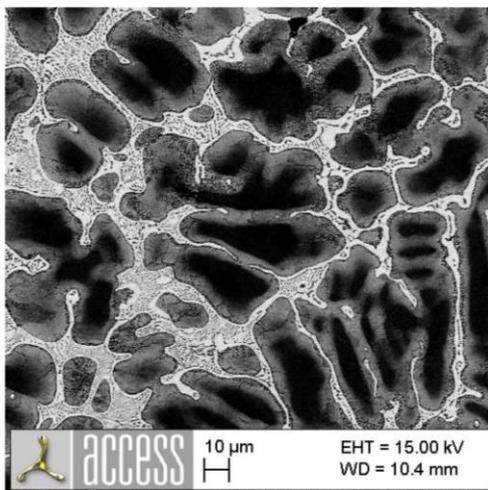
Zn-20Al-0.7Cu合金

等温断面図

T = 375°C

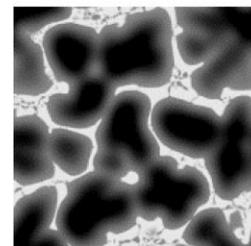


SEM画像 (a)

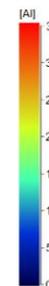
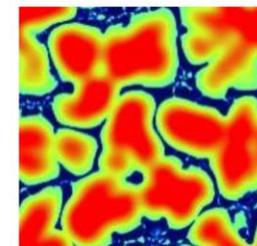


凝固計算結果

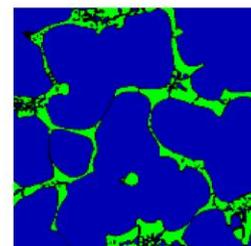
(b)



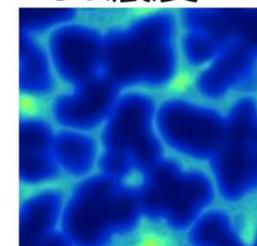
Al濃度



(d)



Cu濃度



緑:η、青:β

相分割はη相 18% とβ相 82% となった。

デンドライトの中心部から外周部に向かってAl 濃度が減少する結果となった。

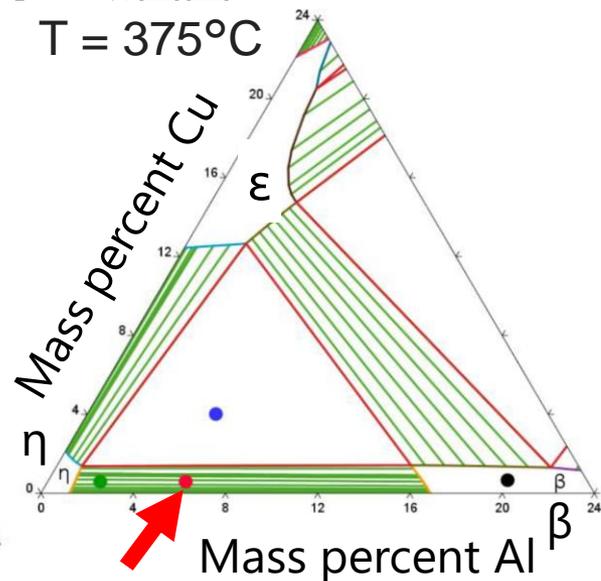
Cuは主に共晶領域内に分布した。

* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

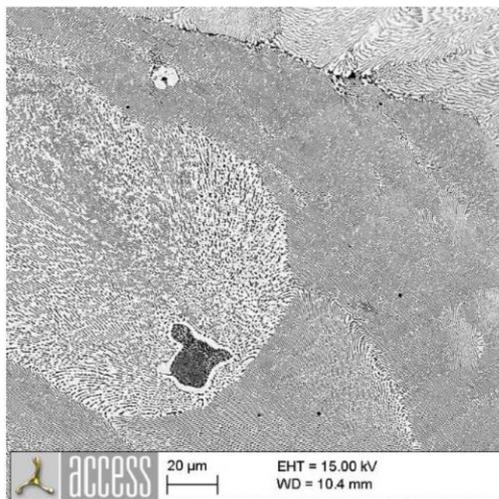
Zn-5.5Al-0.7Cu合金

等温断面図

T = 375°C

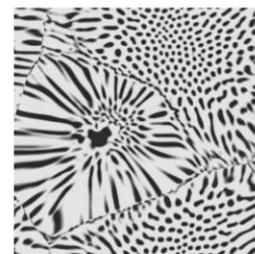


SEM画像 (a)

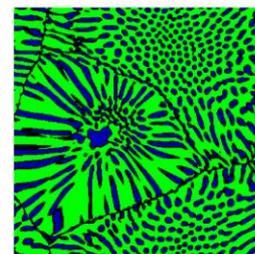


凝固計算結果

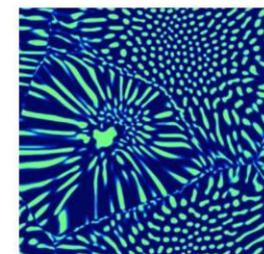
(b)



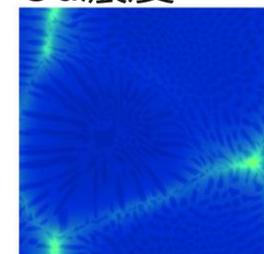
(d)



Al濃度



Cu濃度



緑:η、青:β

相分割はη相 67% とβ相 33% となった。

共晶相に完全に囲まれた小さなηまたはβ核の形成により組織形成された。

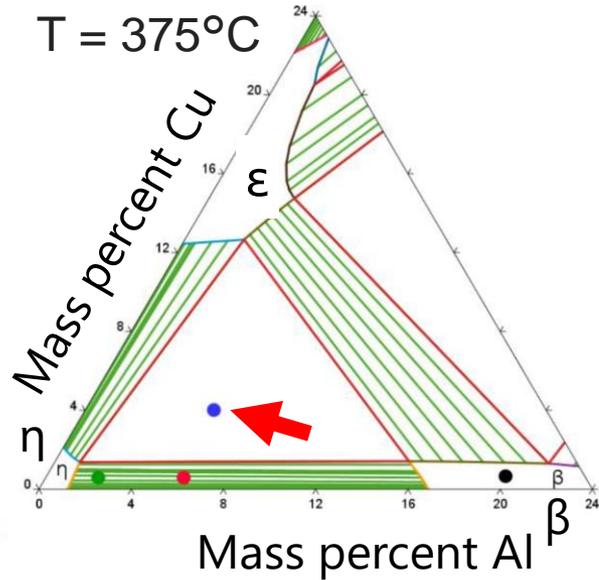
Cu濃度は局所的に共晶粒の境界で最も高くなっている。

* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

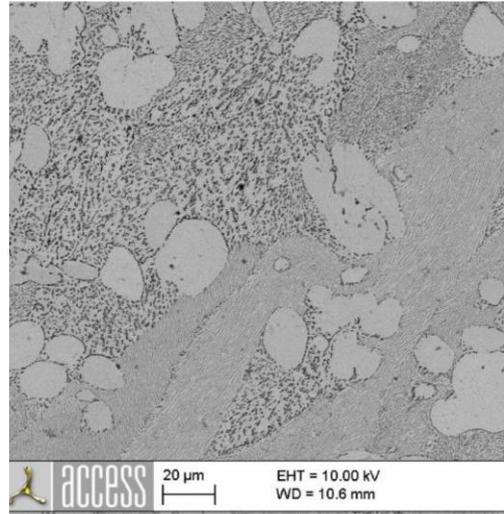
Zn-5.5Al-4Cu合金

等温断面図

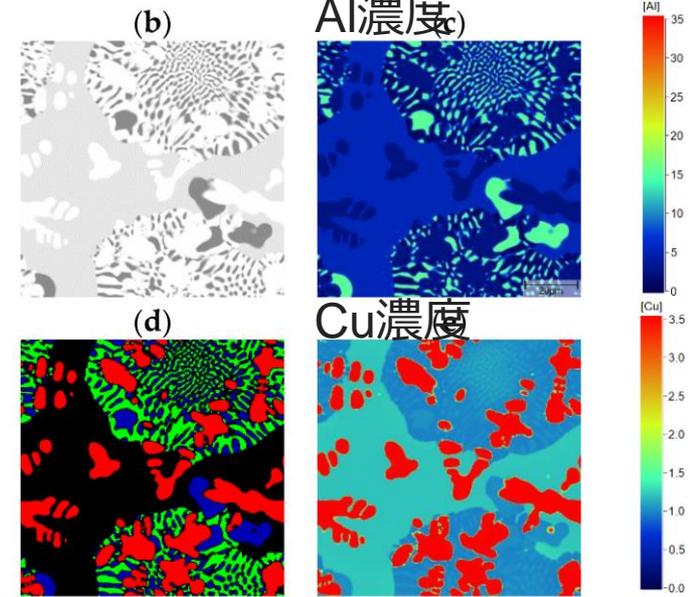
T = 375°C



SEM画像 (a)



凝固計算結果(固相率62%)



緑:η、青:β、ε:赤、Liquid:黒

η相、β相およびε相の3相が液相から成長し、ε相が主体の三元共晶微細構造を形成
観察が困難なε-Zn₄Cuを含む相分率、粒サイズ、分布を図示可能

* S. Gimmler, M. Apel, A. Bührig-Polaczek, Metals 2020, 10, 1659.

シミュレーションにより得られた相分率やCu濃度をもとに硬度の予測を実施

相*i*の硬度予測モデル： $HB^i = HB_0^i + a^i \cdot [Cu]^i$

合金の硬度予測モデル： $HB^i = \sum_i f^i \cdot (HB_0^i + a^i \cdot [Cu]^i)$

各相の硬度予測モデルの作成

Alloy

ZnAl1Cu0.7: 98% η , 2% β .

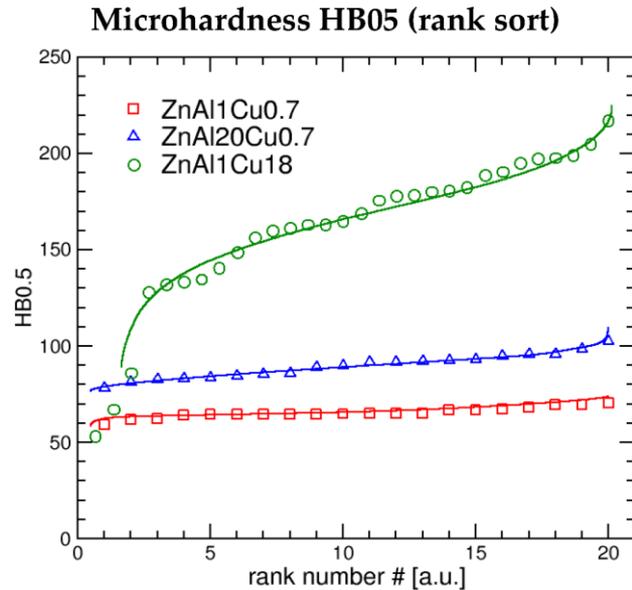
$HB_0^\eta = 35$, $a^\eta = 45$.

ZnAl20Cu0.7: 93% β , 7% η .

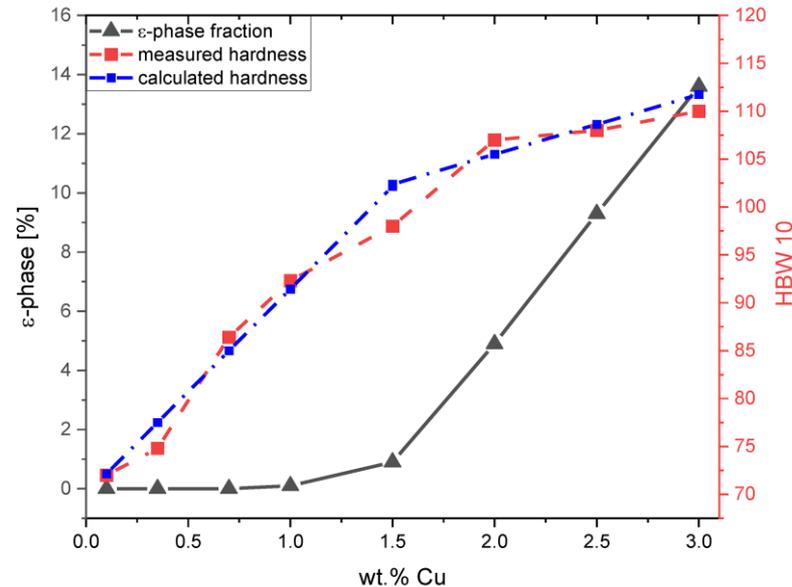
$HB_0^\beta = 70$, $a^\beta = 28$.

ZnAl1Cu18: 98% ϵ , 2% η .

$HB = 110 + 16 \cdot ([Cu] - 14.5)$.



Zn-5Al-XCu合金の硬度予測結果



硬度予測において、相分率とCu濃度といった微細構造に相関があるモデルにより、測定値とよく一致する結果となった。

MICRESS



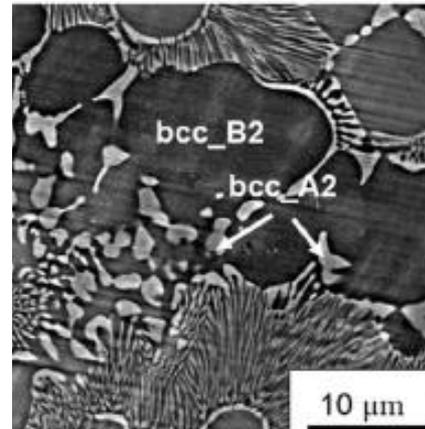
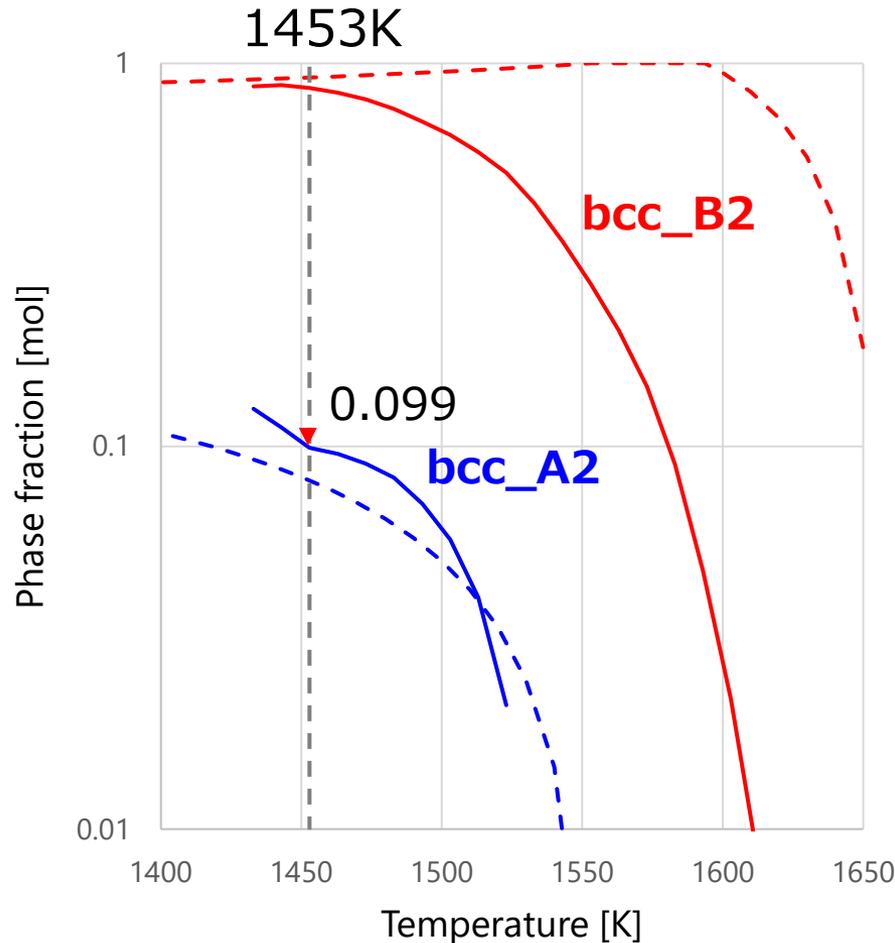
合金組織形成計算ソフトウェア

概要

計算例

- 球状黒鉛鑄鉄の3D解析
- Zn合金の組織および硬度予測
- **その他**

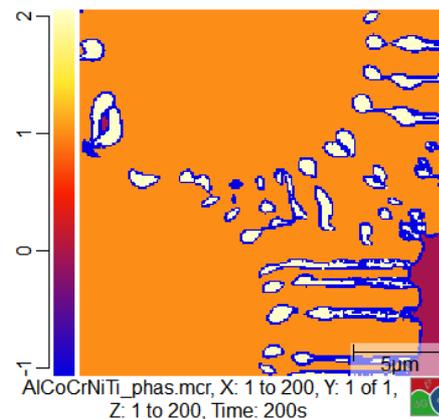
*Y. Zhao, *et al.*, Investigation on Phase Stability of $\text{Al}_x\text{Co}_{0.2}\text{Cr}_{0.2}\text{Ni}_{0.2}\text{Ti}_{0.4-x}$ High Entropy Alloys, *J. Phase Equilib. Diffus.*, 2018, 39(5), 610-622



実験観察結果*

鑄造まま材

A2相分率 :
0.10



解析結果

200 sec, 1453 K

Liquid
 bcc_B2
 bcc_A2

A2相分率 :
0.099

- B2/A2相が伸長した組織が形成 (組織形態的に近い組織が得られた)
- 凝固組織中のA2相分率が増加

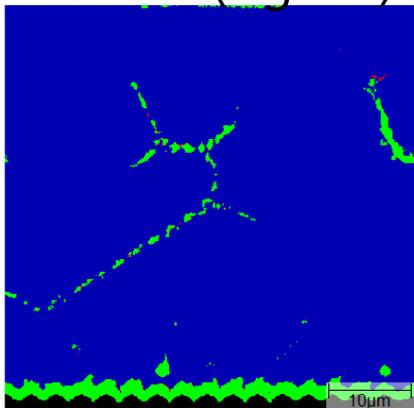
相分布

■ Ag_3Sn

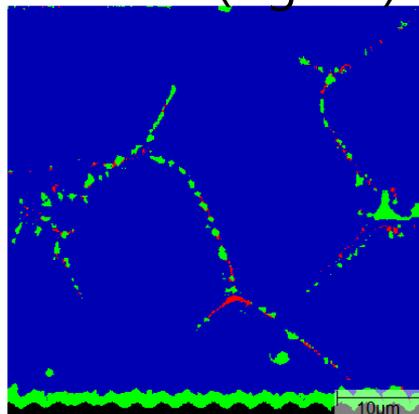
■ Cu_6Sn_5

■ $\beta\text{-Sn}$

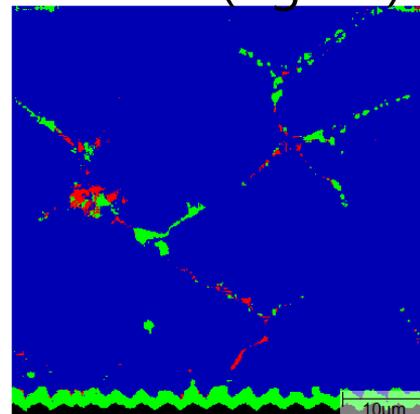
SAC105 (Ag:1%)



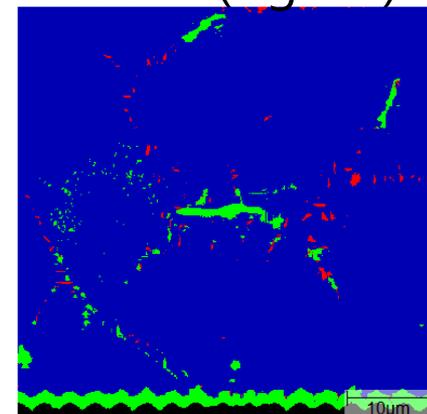
SAC205 (Ag:2%)



SAC305 (Ag:3%)

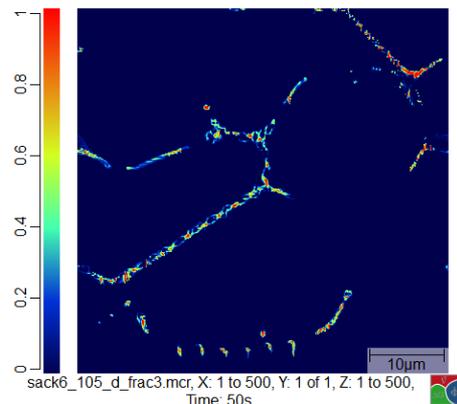


SAC405 (Ag:4%)

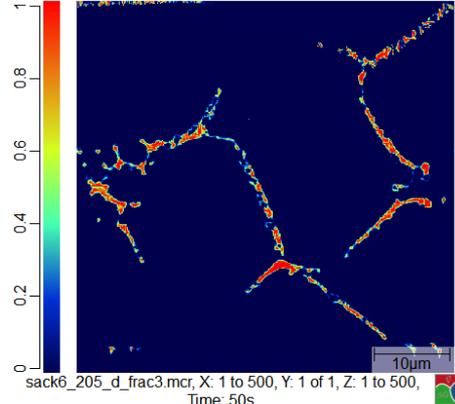


Ag_3Sn の体積分率

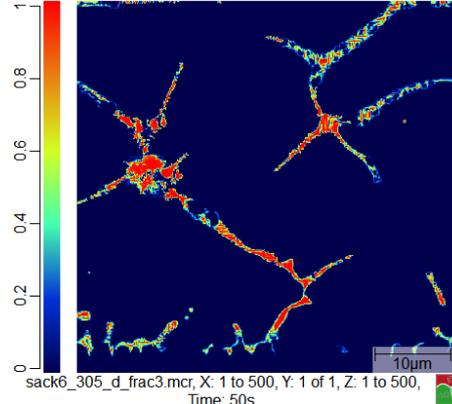
SAC105



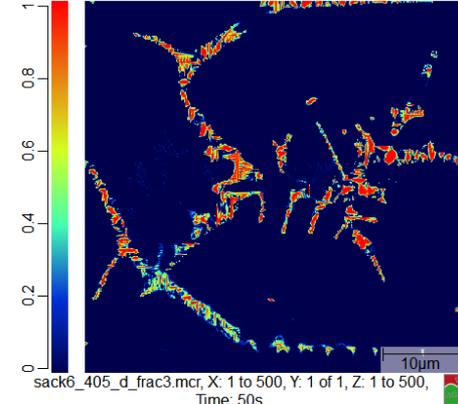
SAC205



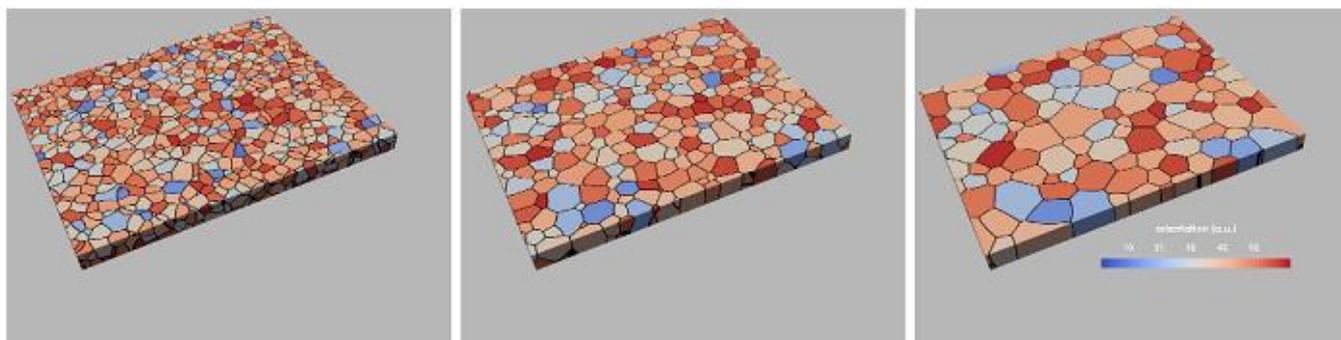
SAC305



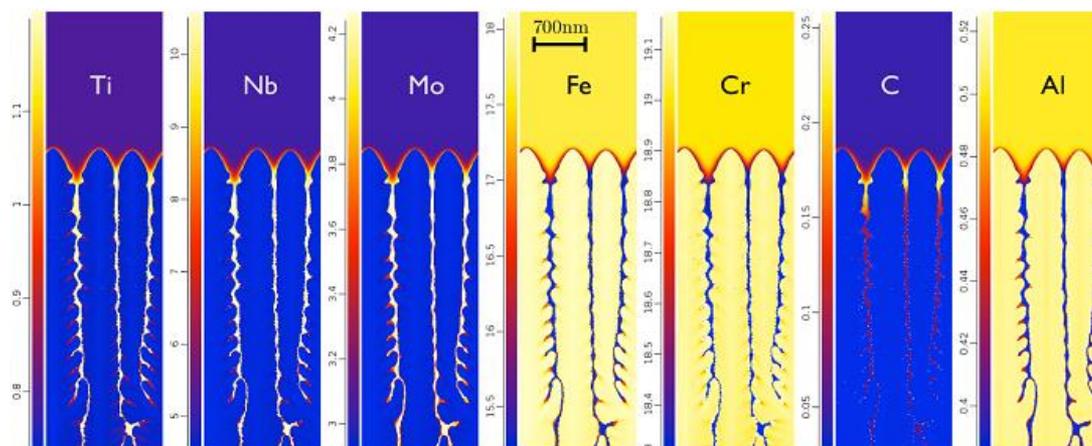
SAC405



- 様々な組成、温度条件でのミクロ組織形成過程を解析することで、
- ・材料中の結晶成長や拡散挙動の解明により材料設計の指針の取得
 - ・実験試行回数・費用の削減
- を図ることができます



結晶粒の粗大化を計算。析出粒子や結晶方位差の考慮なども可能



任意の温度履歴における凝固過程の濃度偏析や化合物生成を解析

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社

科学システム本部 CAEソリューション営業部
東京都港区虎ノ門4-1-1 神谷町トラストタワー

TEL: 03-6403-2170

E-mail: thermo-calc@ctc-g.co.jp

URL: <http://www.engineering-eye.com/>