

研究課題名

熱間加工された炭素鋼におけるフェライト変態挙動の フェーズフィールドモデリングと実験検証

研究代表者名

東京農工大学・大学院工学研究院先端機械システム部門・山中晃徳

1. はじめに

鉄鋼材料の熱間圧延や連続冷却プロセスで生じる固相変態によるマイクロ組織形成過程を予測するための数値シミュレーション技術の開発は現在でも活発に行われている。最近では、マルチフェーズフィールド(MPF)法に基づくマイクロ組織形成過程のシミュレーションが注目されている。本研究では、鉄鋼材料で生じるオーステナイト→フェライト($\gamma \rightarrow \alpha$)変態による α 相の形成を予測するためのMPFモデルの構築を進めてきたが、シミュレーション結果の実験的検証が十分でなかった。そこで平成25年度の研究課題では、東北大学金属材料研究所の熱間加工再現試験装置(TM-Z)を用いて、炭素鋼の熱間圧縮試験と連続冷却過程における α 相の体積分率変化の測定および光学顕微鏡による α 相の結晶粒径の測定を行った。さらに、実験結果とMPF法による2次元シミュレーションの結果を比較した。しかしながら、 α 相の粒径分布については実験結果と2次元シミュレーションの結果に大きな差異が見られた。この差異を無くし、実験結果との定量的な比較を行うためには、①合金熱力学データベース Thermo-calc との連成計算法の構築、②3次元空間でのMPFシミュレーションを行うことを昨年度の課題とした。

本報告書では上記②の成果として、昨年度得られた実験結果との定量的な比較を行うために、結晶塑性高速フーリエ変換法とMPF法を組み合わせたシミュレーション法を構築し、熱間圧縮試験における γ 相の変形挙動と連続冷却における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動の3次元シミュレーションについて報告する。なお、本シミュレーション結果の詳細については、文献[1]を参照して頂きたい。

2. シミュレーション手法

2. 1. 結晶塑性高速フーリエ変換法

本研究では、熱間圧縮試験における γ 相の変形挙動を解析するために、結晶塑性高速フーリエ変換(CPFPT)法を用いた。CPFPT法では、グリーン関数法に基づき応力の平衡方程式(変位速度に関する微分方程式)をひずみの適合方程式と所与の応力境界条件を満足するようにフーリエ変換で解くため、非常に効率的な数値計算が可能である[2]。

本研究では、Peirceらが提案した現象論的結晶塑性構成式を用いたCPFPT法により、多結晶 γ 相の圧縮変形シミュレーションを行った。シミュレーションに用いた代表体積要素(RVE)の大きさは、 $12.8 \times 12.8 \times 12.8 \mu\text{m}^3$ であり、 $128 \times 128 \times 128$ の規則格子で分割した。初期 γ 相の結晶方位はランダムとし、結晶粒数は200であり、その分布はMPF法による多結晶粒成長シミュレーションにより作成した。本研究では、RVEにひずみ速度 10^{-3} s^{-1} で平面ひずみ圧縮変形を与えるシミュレーションを実施した。

2. 2. 古典的核形成理論に基づく α 相の核形成挙動の推定

CPFPT法を用いた γ 相の熱間圧縮変形シミュレーションにより、 γ 相中の蓄積エネルギー分布と結晶方位分布が得られる。本研究では、変形した γ 相から α 相が核形成する位置(サイト)として、粒界コーナー、粒界エッジ、粒界面および粒内の4種類を考慮し、各サイトにおける核形成速度 $J^{(i)}$ を古典的核形成理論に基づく次式により推定した[3]。

$$J^{(i)} = \frac{K_1^{(i)}}{\sqrt{kT}} \exp\left(\frac{-K_2}{\Delta G_\gamma kT}\right)$$

ここで、上付き添え字の i はサイトの種類を表しており、 $i=1$ のとき粒界コーナー、 $i=2$ のとき粒界エッジ、 $i=3$ のとき粒界面、 $i=4$ のとき粒内の核形成サイトに対応する。 $K_1^{(i)}$ は各サイトの密度、 K_2 は α 相の核の界面エネルギーに関するパラメータ、 ΔG_γ は α 相の核形成の駆動力である。本研究における各サイトの密度の計算については、圧縮変形により γ 相中に生じた蓄積エネルギーの60%以上であり、かつ結晶方位差が 15° 以上の箇所とした。

2. 3. MPF法

CPFPT法による γ 相の圧縮変形シミュレーションの結果と古典的核形成理論に基づき推定した核形成サイトからの α 相の成長をMPF法で解析する。本研究では、昨年度の研究課題で使用したMPFモデルを3次元に拡張した。解析領域の大きさ、差分格子点数は2.1節で説明したものと同一である。本研究では簡単のため、Fe-C2元系を想定し、初期炭素濃度を0.15 wt.%とした。初期温度は1023Kとし、5 K/sの冷却速度で連続冷却する際の α 相の成長を解析した。

3. 研究成果

Fig. 1に、CPFPT法を用いた γ 相の圧縮変形シミュレーションにおいて、公称ひずみ0.2まで平面ひずみ

圧縮変形された際の γ 相内の蓄積エネルギー分布と結晶方位差分布を示す。Fig. 1(a)より γ 相の結晶方位に依存して変形が集中し、蓄積エネルギーが高くなる結晶粒が存在することがわかる。また、図中の矢印 A~C で示したように、粒界近傍において蓄積エネルギーが集中して高くなることがわかる。一方、Fig. 1(b)より γ 相の結晶粒内でも大きな結晶方位差を示す箇所が見られ、 α 相の核形成サイトとなる可能性を示している。

MPF 法による $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態のシミュレーションで得られた結晶粒の成長と炭素濃度分布の時間変化をそれぞれ Fig. 2(a)と Fig. 2(b)に示す。Fig. 2(a)において、黒色の領域が粒界、白色の領域で初期粒径が小さい結晶粒が α 相を示しており、Fig. 1(a)で矢印 A~C で示した箇所に核形成していることがわかる。また、Fig. 2(b)からも明らかのように、それらの α 相が炭素拡散を伴いながら成長する様子を再現している。

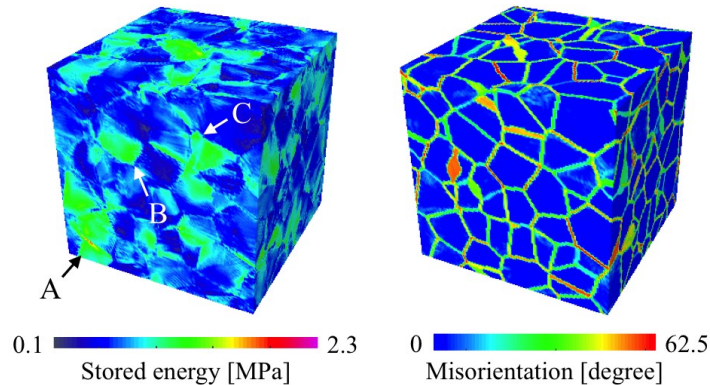


Fig. 1. Distributions of (a) stored energy and (b) misorientation in the austenite phase deformed by plane strain compression up to nominal strain of $\varepsilon_n = 0.2$.

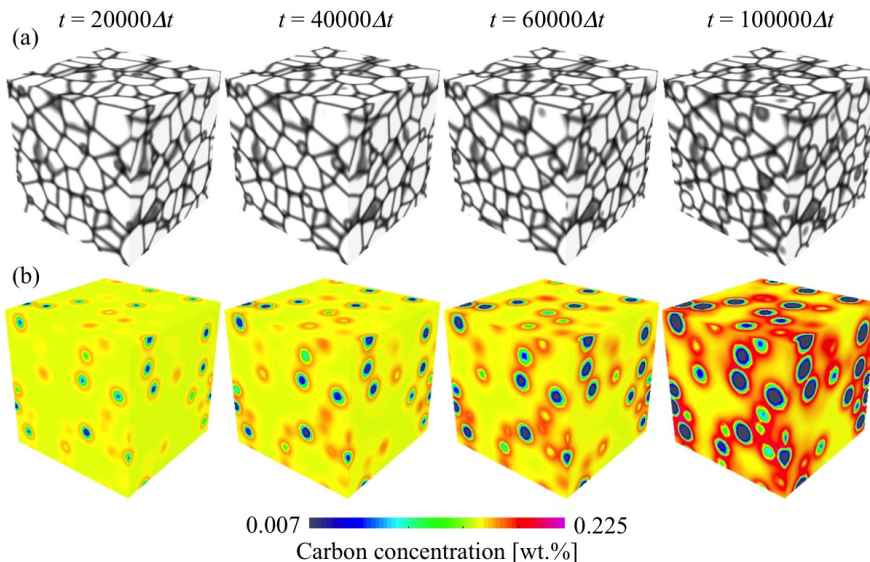


Fig. 2. (a) Evolutions of crystal grain during the austenite-to-ferrite transformation. Black region shows grain boundary and white region shows ferrite and austenite grains. (b) Evolution of carbon concentration during the austenite-to-ferrite transformation. The initial temperature was 1023 K and the cooling rate was 5 K/s.

4. まとめ

CPFPT 法と MPF 法を組み合わせたシミュレーションを実施し、熱間圧縮試験における γ 相の変形挙動と連続冷却における $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態挙動を 3 次元で再現することが可能となった。これにより、平成 25 年度の研究課題で取得した実験結果との直接比較が可能となる。今後の研究において、実験で測定された粒径分布について実験結果とシミュレーション結果と比較を行い、実験結果を高精度に再現するシミュレーションモデルの改良およびパラメータ同定方法を検討する予定である。

参考文献

- [1] A. Yamanaka, Proceedings of International Conference on Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials (PTM2015), accepted for publication.
- [2] P. Eisenlohr, M. Diehl, R. A. Lebensohn, F. Roters, Int. J. Plasticity, 46 (2013), pp.37-53.
- [3] M. Umemoto, Z. H. Guo, I. Tamura, Mater. Sci. Technol., 3 (1987), pp.249-255.
- [4] A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, ISIJ Int., 52 (2012), pp. 659-668.