

二相組織鋼の階層構造を考慮した力学解析手法の構築

熊本大学 材料・応用化学工学科

准教授 眞山 剛

(平成 29 年度 一般研究開発助成 AF-2017010)

キーワード： 複相合金, 有限要素解析, 結晶塑性構成式

1. 研究の目的と背景

構造用金属材料に求められる特性として, 高い強度に加えて適度な延性が挙げられる. 多くの単相材料の場合は, 強度と延性はトレードオフの関係にあるが, 高強度を担う相と高延性を担う相からなる複相材の場合には, その組織形態に依存して強度と延性の両者に優れる特性を持ち得る. 工業的に重要な鉄鋼材料においては, フェライト/マルテンサイト二相組織(DP)鋼が, 高い強度と延性を併せ持つ材料として知られており, 自動車用鋼板として実用化されている^{1,2)}. さらに, 変形過程における相変態や双晶形成をも利用して強度と延性に優れた鉄鋼材料が数多く開発されているが, 組織の複雑化に伴い, 力学特性の発現機構を把握し, 特性を定量的に予測することは, より困難になっている.

本研究では, 複相鋼における組織と特性に関する基礎的な知見を得ることを目的として, これまでに著者らが構築してきた結晶塑性有限要素解析手法³⁾⁶⁾を用いて, (i)初期集合組織, (ii)各相の体積分率, (iii)軟質相の特性, それぞれが複相鋼多結晶体の変形挙動に及ぼす影響を数値的に調査した.

2. 解析方法

2.1 結晶塑性構成式

本研究では Peirce ら⁷⁾により提案された速度依存型結晶塑性構成則を導入した大変形有限要素法を用いた. すべり系 α のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を次式で仮定する.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (1)$$

ここで, $\tau^{(\alpha)}$, m , および $\dot{\gamma}_0$ は, それぞれすべり系 α の分解せん断応力, ひずみ速度依存性指数, および参照せん断ひずみ速度を表している. 速度依存性が十分に小さいとき, 式(1)中 $g^{(\alpha)}$ はすべり系 α の臨界分解せん断応力(CRSS)と近似的に一致する. すべり系レベルでの加工硬化挙動を表現する $g^{(\alpha)}$ の発展則として, 本研究では下記の硬化則を用いた.

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{d\hat{\tau}^{(\alpha)}}{d\Gamma} \Omega^{(\alpha\beta)} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \quad (2)$$

ここで, $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間の相互作用を表現する係数であるが, 本研究ではすべての組合せが等価であると仮定して, $\Omega^{(\alpha\beta)} = 1$ を用いた. また, 式(2)中の $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ は, 全すべり系の累積すべり量 Γ の関数である次式 Voce 則を用いた.

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + \left(\tau_1^{(\alpha)} + \theta_1^{(\alpha)} \Gamma \right) \left\{ 1 - \exp \left(- \frac{\theta_0^{(\alpha)} \Gamma}{\tau_1^{(\alpha)}} \right) \right\} \quad (3)$$

上式中の $\tau_0^{(\alpha)}$, $\tau_1^{(\alpha)}$, $\theta_0^{(\alpha)}$, および $\theta_1^{(\alpha)}$ は加工硬化挙動を表現する材料パラメータである.

2.2 解析モデル

本研究では解析対象として DP 鋼を想定し, その構成相であるフェライト相およびマルテンサイト相の変形機構としては, いずれも $\{110\}\langle 111 \rangle$ および $\{112\}\langle 111 \rangle$ すべり系を考慮した. また, マルテンサイト相については, 晶壁面内/面外異方性^{8,9)}を考慮した. 式(1)~(3)中の材料パラメータは, マイクロ材料試験結果¹⁰⁾に対して同定された値を用いた.

図 1 は本解析で使用した解析モデルを示している. モデル形状は図 1a に示すような薄板状の引張試験片とし, 標点間に試料の厚さ方向を高さ方向とする六角柱の結晶粒が一樣に含まれる多結晶体とした. 各相の初期配置としては, 図 1b に示すようにマルテンサイト体積分率 50%を標点間にランダムに配置させたモデルを作成し, その配置および体積分率依存性について調査した. 初期集合組織としては, 図 1c および図 1d に示した, ランダム集合組織および α ファイバー集合組織¹¹⁾を用いた. なお, 各相の配置

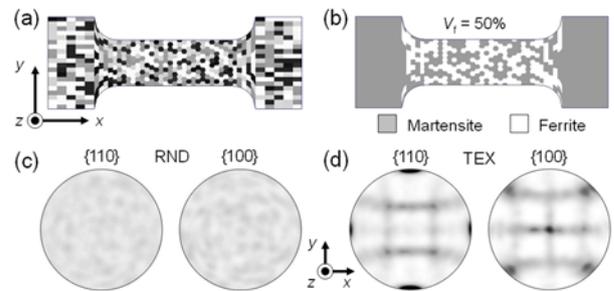


図 1 本解析に使用した解析モデル. (a) 試料および結晶粒形状, (b) 各相配置の一例($V_f = 50\%$), (c) ランダム集合組織, (d) α ファイバー集合組織.

は、擬乱数を用いて分布を与えたため、異なる乱数の組合せによる結果の変動を確認するため、10 組の初期配置を持つモデルを作成して、それらの平均挙動やばらつき(標準偏差)についても評価した。

3. 解析結果

3.1 集合組織が変形挙動に及ぼす影響

図2はマルテンサイト相を50%含むランダム集合組織(RND $V_f = 50\%$)および α ファイバー集合組織(TEX $V_f = 50\%$)による引張負荷解析結果の応力-ひずみ曲線および加工硬化率の変化を示している。図2(a)より、変形初期にはいずれの集合組織の場合もほとんど同一の挙動を示しているが、ひずみ1.5%程度から α ファイバー集合組織の場合により顕著な軟化が生じていることがわかる。これは図2bにおいて、 α ファイバー集合組織では途中から負の加工硬化率を示していることに対応する。

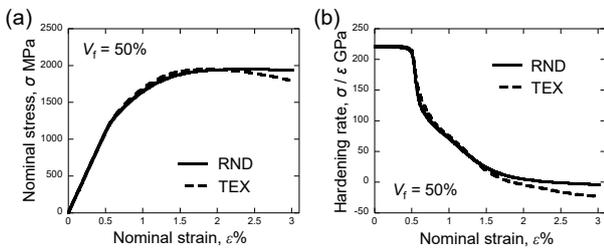


図2 集合組織依存性. (a) 応力-ひずみ挙動, (b) 加工硬化率の変化.

図3は、図2に示した変形過程における相当ひずみ分布の変化を示している。まず、図3aに示したランダム集合組織の結果を見ると、変形初期のひずみ1%において既に変形は著しく不均一であり、ひずみの増加に伴い特定の箇所にはひずみが局所化していく様子がわかる。図3bに示した α ファイバー集合組織の場合もひずみ1%の時点ではランダム集合組織の場合とほとんど同様の分布であるが、ひずみ2%以上ではより顕著な局所化が生じていることがわかる。

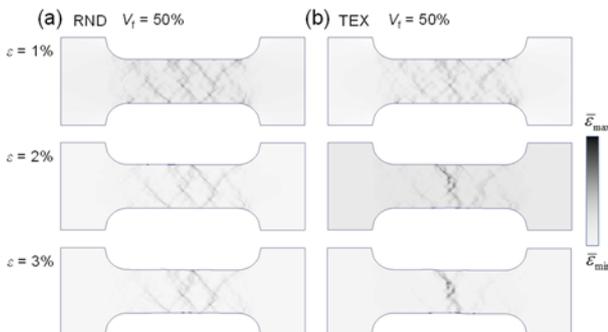


図3 相当ひずみ分布変化. (a) ランダム集合組織(RND), (b) α ファイバー集合組織(TEX).

図2, 3に示した結果は、図1bに示した相配置に依存する可能性が高い。したがって次に、異なる乱数の組を使用して作成した異なる10種類の配置を持つモデルを用いた結果より、初期集合組織の影響を平均挙動および結果のばらつきの点から評価する。

図4は、各相の配置が異なる10種類のモデルを用いて得られた解析結果である。図4a, bは、それぞれ10回の解析により得られた応力-ひずみ曲線を重ねて示している。これらの結果より、全体的な傾向としてランダム集合組織よりも α ファイバー集合組織の方が、図2の結果と同様に途中から軟化する傾向があることがわかる。また、 α ファイバー集合組織の方が、10回の解析結果により大きなばらつきが生じていることもわかる。これらの結果を明確に示すため、図4c, d中の実線および破線により平均の応力-ひずみ曲線および各ひずみ量における応力の標準偏差を範囲として示した。図4c, dより、 α ファイバー集合組織の方が、軟化の傾向が大きく、各相の配置による影響が顕著であることがわかる。

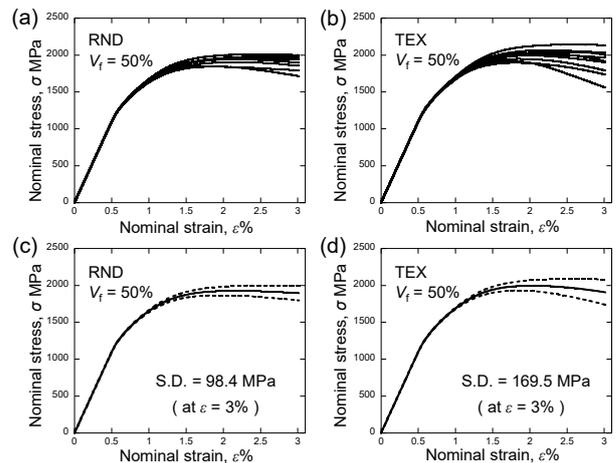


図4 各相の配置が変形挙動に及ぼす影響. (a), (c) ランダム集合組織(RND), および(b), (d) α ファイバー集合組織(TEX).

図2~4に示した変形挙動の集合組織依存性に及ぼす結晶格子回転の影響を調査するため、結晶方位を更新させない(NoRot)条件で図4と同様の計算を実施した。図5の実線と破線は、その平均応力-ひずみ挙動と応力の標準偏差を示している。図5aに示したランダム集合組織の場合は、図4cに示した格子回転を考慮した場合と大きな違いが認められない。これに対して、図5bに示した α ファイバー集合組織の場合は、格子回転の抑制によりひずみ2%以降の軟化量が減少していることに加えて、10種類のモデル間のばらつきが大きく減少していることがわかる。これらのことは、 α ファイバー集合組織に対して引張負荷を与えた際には、幾何学的に軟化する傾向があり、その軟化量は各相の配置に強く依存することを示唆している。

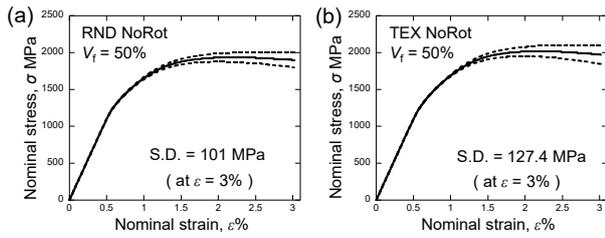


図5 結晶格子回転が変形挙動に及ぼす影響. (a) ランダム集合組織(RND), (b) α ファイバー集合組織(TEX).

3.2 マルテンサイト相体積率が変形挙動に及ぼす影響

二相組織鋼における各相の体積率は、プロセスにより異なり得るため、ここではマルテンサイト相の体積率を10, 30, 70, 90%とした場合について、それぞれの変形挙動を調査した。図6 a-dは、それぞれマルテンサイト相の体積率(V_f)が10, 30, 70, 90%とした場合の各相配置例である。ここでも、前節と同様に体積率ごとに10種類の異なる配置を持つモデルを生成して解析を実施した。なお、初期集合組織はランダム集合組織とした。

図7 a-dは、それぞれマルテンサイト相を10, 30, 70, 90%含むランダム集合組織を持つモデル RND $V_f = 10\%$, RND $V_f = 30\%$, RND $V_f = 70\%$, および RND $V_f = 90\%$ の引張負荷解析結果の応力-ひずみ曲線を示している。実線と破線はそれぞれ平均応力-ひずみ曲線と応力の標準偏差を示している。これらの結果より、マルテンサイト体積率の増加に伴い、流動応力が大きくなると共に、ひずみ2%以降の軟化傾向が顕著になり、さらに相配置による応力のばらつきが大きくなるのがわかる。図7に示した平均応力-ひずみ挙動から算出した強度と変形能に関する値を図8に示す。図8 aにおいて0.2%耐力(YS)は塑性ひずみ0.2%時点での応力、最大応力(UTS)は公称応力の最大値としている。また、図8 bは、最大応力(UTS)時点における全ひずみと塑性ひずみをプロットしている。図8 aより、0.2%耐力と最大応力は、マルテンサイト相の体積率増加に伴い単調に増加していることがわかる。一方で図8 bより、最大応力時の全ひずみや塑性ひずみは、 $V_f = 50\%$ までは体積率の増加に伴い上昇し、それ以上の体積率では低下する傾向を示している。

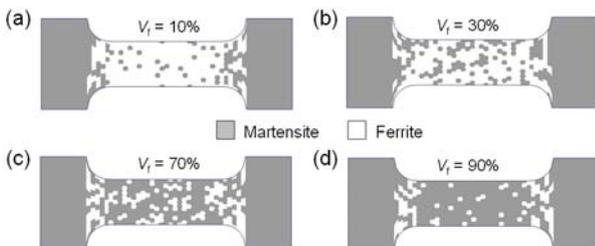


図6 マルテンサイト相体積率(V_f)が異なる解析モデルの各相配置例. (a) $V_f = 10\%$, (b) $V_f = 30\%$, (c) $V_f = 70\%$, (d) $V_f = 90\%$.

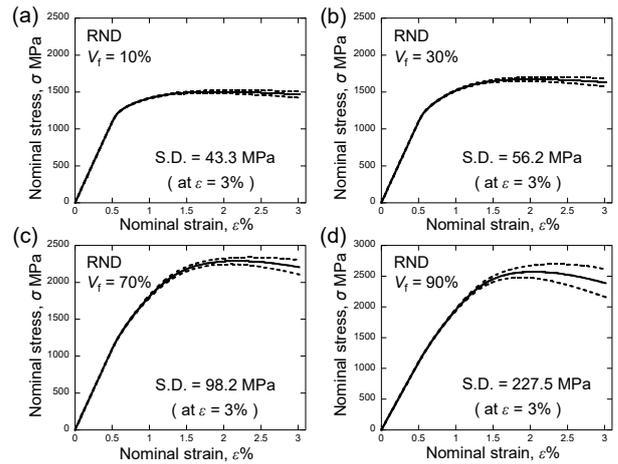


図7 マルテンサイト相体積率(V_f)が変形挙動に及ぼす影響(ランダム集合組織 RND の場合). (a) $V_f = 10\%$, (b) $V_f = 30\%$, (c) $V_f = 70\%$, (d) $V_f = 90\%$.

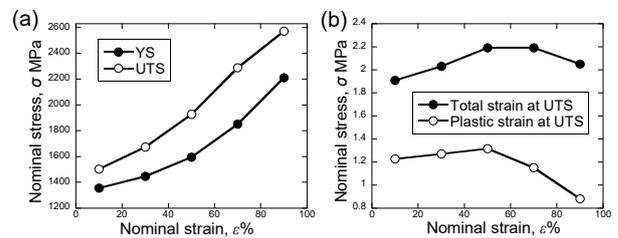


図8 マルテンサイト相体積率(V_f)が強度と変形能に及ぼす影響. (a) 0.2%耐力(YS)と最大応力(UTS). (b) 最大応力時の全ひずみと塑性ひずみ.

3.3 フェライト相の特性が変形挙動に及ぼす影響

これまでの解析では、比較的大きな結晶粒径を持つフェライト相の材料挙動を表現する材料パラメータ(CR60)を使用してきたが、二相鋼中のフェライト相はプロセスに依存して著しく微細な結晶粒にもなり得る。このような微細フェライト相の変形挙動を表現する材料パラメータ(CR88)¹⁰を用いた際の巨視的挙動について、以下に解析結果を示す。

図9 aは、本解析で用いた材料パラメータを式(3)に対して用いることにより得られる、 $\hat{\tau}$ と累積すべり量 Γ の関係を示している。本節で用いるCR88の $\hat{\tau}$ は、前節までに用いてきたCR60と比べて著しく高い値を示しており、マルテンサイト相の晶壁面内すべり系と晶壁面外すべり系の間の値を持つことがわかる。図9 bは、図4 cに示したマルテンサイト相50%でランダム集合組織を持つモデル($V_f = 50\%$ RND)に対して微細フェライト相の材料パラメータCR88を用いた解析結果を示している。図4 cと比べると流動応力が著しく上昇していることに加えて、10種類の初期配置による応力のばらつきが非常に小さいことがわかる。

次に、図2に示したマルテンサイト相を50%含む、初期集合組織としてランダム集合組織と α ファイバー集合組

織を持つモデル($V_f = 50\%$ RND および $V_f = 50\%$ TEX)に対して、フェライト相の材料パラメータとしてCR60とCR88を用いて実施した解析結果の比較を図10に示す。図10aより、いずれの集合組織でも、図9aで示したようにフェライト相の参照応力がより大きなCR88の場合に二相材としての流動応力も著しく大きい値を示すことがわかる。また、CR88の場合は、 α ファイバー集合組織の方がランダム集合組織よりも高い流動応力を示しており、さらにひずみ3%まではCR60でみられた応力の軟化が生じていないこともわかる。図10bは応力と塑性ひずみの関係を示しているが、この図からもCR88の α ファイバー集合組織では、CR60と比べて応力の軟化が抑制されていることがわかる。図10cに示しているランダム集合組織(RND)における加工硬化率の変化は、CR60とCR88の結果が比較的類似の傾向を示しているが、図10dに示している α ファイバー集合組織(TEX)の加工硬化率の変化は、CR60とCR88とで顕著に異なり、CR60では塑性ひずみが1%となる前に負の硬化率を持つものに対して、CR88では塑性ひずみ2%程度まで正の硬化率を持つことがわかる。

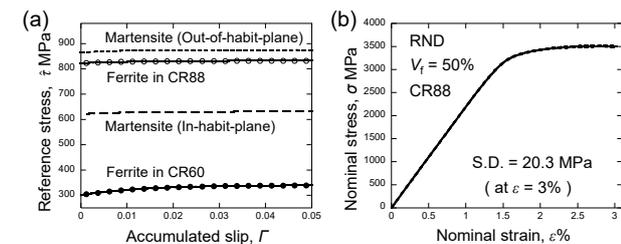


図9 微細フェライト相の材料パラメータ(CR88)を用いた変形解析。(a) 各変形機構における $\hat{\sigma}$ と累積すべり量 Γ の関係。(b) RND $V_f = 50\%$ CR88の解析結果。

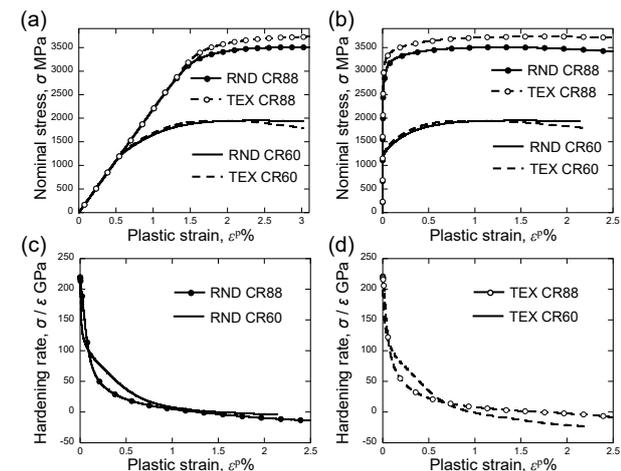


図10 微細フェライトの材料パラメータが $V_f = 50\%$ モデルの変形挙動に及ぼす影響。(a) 応力-ひずみ挙動。(b) 応力-塑性ひずみ曲線。(c) ランダム集合組織(RND)における加工硬化率の変化。(d) α ファイバー集合組織(TEX)における加工硬化率の変化。

4. 結び

以上に示した解析結果は、マイクロ材料試験により得られた単結晶特性を用いて実施した多結晶解析の結果であるが、いずれの結果においても現実の材料で測定されるよりもかなり大きな巨視的流動応力を示している。この理由としては、今回の解析モデルおよび境界条件に起因する変形拘束がバルク材と比べて厳し過ぎること、実材料に存在し得る様々な欠陥を考慮していないこと、孤立単結晶の挙動が多結晶内における各結晶粒の挙動とは必ずしも一致しないこと等、様々な要因が考えられる。今後、さらに定量的な予測を実現するためには、さらなる基礎研究を継続的に実施することが不可欠である。一方で、本解析で実施したようなパラメータスタディからも定性的な知見を得ることはできる。実材料として実現可能なパラメータ空間の下で系統的な数値解析を実施し、そこで得られる知見を材料設計やプロセス設計に役立てることが今後の課題である。

謝辞

本研究は、公益財団法人天田財団の一般研究開発助成を受けて実施したものであることを付記して謝意を表します。また、本研究の実施にあたり、共同研究者である熊本大学の高島教授、峯教授、郭助教より様々なご助言を頂きました。御礼を申し上げます。

参考文献

- 1) M. Y. Demeri: *Advanced High-Strength Steels: Science, Technology, and Applications*. ASM International (2016).
- 2) 牧 正志: *鉄鋼の組織制御 その原理と方法*. 内田老鶴圃 (2015).
- 3) T. Mayama, T. Ohashi, Y. Tadano, and K. Hagihara: *Mater. Trans.* **56** (2015) 963-972.
- 4) D. Kishi, T. Mayama, Y. Mine, and K. Takashima: *Scripta Mater.* **142** (2018) 1-5.
- 5) T. Mayama, M. Tane, and Y. Tadano: *Acta Mater.* **165** (2019) 62-72.
- 6) K. Takagi, T. Mayama, Y. Mine, and K. Takashima: *J. Alloys Compounds* **806** (2019) 1384-1393.
- 7) D. Peirce, R. J. Asaro, and A. Needleman: *Acta Metall.* **31** (1983) 1951-1976.
- 8) Y. Mine, K. Hirashita, H. Takashima, M. Matsuda, and K. Takashima: *Mater. Sci. Eng. A* **560** (2013) 535-544.
- 9) K. Kwak, T. Mayama, Y. Mine, and K. Takashima: *Mater. Sci. Eng. A* **674** (2016) 104-116.
- 10) S. Ogata, T. Mayama, Y. Mine, and K. Takashima: *Mater. Sci. Eng. A* **689** (2017) 353-365.
- 11) U. F. Kocks, C. N. Tomé, and H. -R. Wenk: *Texture and Anisotropy*. Cambridge (1998).