

技術論文

熱間圧延鋼板における圧延および変態集合組織の定量予測

Quantitative Prediction of Deformed Austenite and Transformed Ferrite Texture in Hot-rolled Steel Sheet

田 中 泰 明*
Yasuaki TANAKA富 田 俊 郎
Toshiro TOMIDA

抄 録

Grain Interaction Model (GIA) と呼ばれる結晶塑性モデルと、二重 K-S 関係 (DKS) モデルと呼ばれる変態モデルの連成による加工 - 変態集合組織の定量予測について検討した。GIA による熱間加工 γ 集合組織の予測に際しては、最密面の他、非最密面上の転位すべりを考慮した。さらに、計算加工 γ 集合組織を持つ母相から隣接する γ の両方と K-S 関係に近い方位のフェライトが優先的に析出すると仮定した DKS モデルにより、変態集合組織の予測を行った。モデル検証のため、C-Si-Mn 鋼を用いて単スタンド熱延実験を行い、残留 γ とフェライトの集合組織を計算と比較した。その結果、GIA と DKS による連成モデルは、実験による熱間圧延 - 変態集合組織を極めて良く再現することが明らかとなった。

Abstract

To achieve quantitative and continuous prediction of textures through the deformation and phase transformation during hot rolling of steel, the integration of the Taylor type crystal plasticity model, called “Grain Interaction model (GIA)”, and the transformation texture model, called “Double Kurdjumov-Sachs relation (DKS)”, has been investigated. The deformed austenite (γ) texture is predicted by GIA with taking into account not only the standard $\{111\}<110>$ slip system but also non-octahedral slip systems. Then the transformed α texture is calculated by DKS, in which a nucleated α prefers to have an orientation relationship near the K-S relation with both of two neighboring γ grains. For validation, single pass hot-rolling test of a C-Si-Mn steel was carried out to prepare steel sheets with some amounts of retained austenite, and then the ferrite texture observed by X-ray diffraction was compared with the simulated texture by the above methods. The comparison between the predicted and the experimental textures shows that the linked model (GIA & DKS) can lead to a remarkable reproduction of the texture of hot-rolled steel sheets.

1. 緒 言

集合組織は鋼板特性に少なからず影響し、その制御はミクロ組織と合わせて重要な製造課題である。集合組織は製造過程の中で刻々と変化しつつ最終製品に至るため、その制御のためには製造中における集合組織の発達過程を知ることが重要である。実際には製造過程における集合組織の発達を直接観察することは容易ではなく、そのため数値計算による予測が期待されている。

熱間圧延 (熱延) 鋼板はそれそのものが製品として用いられるだけでなく、さらに冷間圧延 (冷延) および焼鈍を経て冷延鋼板製品となる。集合組織は工程間で引き継がれ、前工程の集合組織は次工程に影響することから、何れにせよ最終製品に好ましい特性を付与するにあたり、まずは熱

延鋼板が持つ集合組織の発達過程を予測することが有用である。

しかしながら、高温域で圧延の後に冷却工程で固相変態を経る熱延鋼板の集合組織がどのように発達するのかは十分には理解されてはおらず、プロセス一貫での定量予測は未だ実現されていない。また、製造工程は加熱炉や多数の圧延スタンドさらには冷却帯からなる複雑工程で、その操業条件は品種によって様々異なることから、経験モデルによるアプローチは事実上困難で定量性に乏しい。そのため、その発達過程を冶金学的な観点から分離し、各素過程について物理法則に則ったモデルを構築して互いに連成させることが、製造工程を一貫した集合組織の定量予測に必要であると考えられており¹⁾、鋼についても検討されつつある²⁾。

鋼の集合組織の発達過程は、加工、再結晶および変態に

* 先端技術研究所 基盤メタラジー研究部 主幹研究員 兵庫県尼崎市扶桑町 1-8 〒660-0891

大別される。本研究では結晶塑性モデルとバリエーション選択モデルの連成によって、熱延鋼板の加工および変態に伴う集合組織の定量予測について検討した。

2. 本 論

2.1 シミュレーションモデル

2.1.1 加工集合組織予測モデル

熱間加工 γ の集合組織を予測するにあたり、Grain Interaction Model (GIA) ³⁾ と呼ばれる結晶塑性モデルを用いた。GIA は Taylor 型の結晶塑性モデルであるが、通常の Taylor モデルとは異なり、結晶粒のすべり変形と回転を隣接する結晶粒を考慮して取り扱うことができる。

図 1 ²⁾ に示すように、モデルは 8 個の結晶粒からなる Aggregate を仮定し、Aggregate の集合によりサンプルが構成されていると考える。サンプルに変形を加えた際に、Aggregate は Taylor モデル同様にサンプル全体の塑性歪み経路に沿って変形するが、Aggregate 内の各結晶粒の変形はサンプルの歪みとは必ずしも一致しなくとも良い。このように Aggregate 内の結晶粒に自由な変形を仮定すると、粒界面で形状の不一致が生ずる。そこでそのような形状不一致を生じる界面には Geometrical Necessary Dislocation (GND) を導入し、材料の連続性を担保する。

結晶塑性モデルは、外部より与えられた変形に対する結晶粒のすべり変形と回転を仮定して加工集合組織の発達を予測するが、その際には各結晶粒で駆動するすべり系を決定する必要がある。Taylor モデルでは変形エネルギーが最小となるすべり系の組み合わせを求めるが、GIA では、(1) 式に示すように Aggregate 内の結晶粒について、変形エネルギー（第一項）と、GND を導入するためのエネルギー（第二項）の和が最小となるように各結晶粒のすべり系を決定する。

$$E_{total} = \sum_{k=1}^8 \sum_{s(k)=1}^6 |\dot{\gamma}_k^s| \tau_{crit,k}^s + \sum_{k=1}^8 \sum_{GBs, IFs} E_{GND} = minimum \quad (1)$$

実際にどのすべり系が選ばれるかは、あらかじめ設定したすべり系の候補とその最大臨界剪断応力 (CRSS)、さらに材料の加工硬化則に依存する。すべり系の候補について、本研究では高温での熱間圧延であることを考慮し、FCC の

最密面、最密方向である $\{111\}\langle 011 \rangle$ に加えて、非最密面すべり系を導入し、 $\{011\}\langle 011 \rangle$ および $\{112\}\langle 110 \rangle$ も取り得るすべり系とした。このような熱間加工における非最密面すべりについてはアルミニウムを主体に幾つかの金属で報告されているものの、その CRSS は最密面すべりの値に比して報告によって 0.75~1.4 と大きな幅があり定かではない ⁴⁻⁶⁾。そこで、本研究では非最密面すべりの CRSS を、最密面すべりのそれと等しいと仮定して計算を行った。

また、熱間における材料の加工硬化則を取り入れるため、歪み速度依存型の加工硬化モデルを GIA と連成させた。誌面の都合のためここでは詳しく述べないが、加工硬化モデルのパラメータは加工フォーマスタによる熱間圧縮試験で得られた熱間応力-歪み特性と一致するように決定した。

ところで、本研究ではロール圧延による熱延鋼板の板厚中心を検討の対象としており、このような場合、サンプルの塑性歪み増分は平面歪み変形に沿う。Taylor 型の結晶塑性モデルに厳密な平面歪み変形を与えて得られる板厚中心の圧延集合組織は、実際よりもかなり先鋭であることが知られている。この不一致を解決する手法として、サンプルの塑性歪み増分に理想的な平面歪み変形からのずれを許容し、剪断成分を導入することが提案されており ⁷⁾、本研究でもこれを用いた。すなわち、(2) 式に示す、Engler ⁷⁾ により提案された歪み増分テンソルを採用し、各要素に許容された範囲内で、各計算ステップ毎にこれらの値をランダムに与えて圧延集合組織の発達を予測した。

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{11} &= 1 \pm 0.1, \dot{\epsilon}_{33} = -1 \pm 0.1, \dot{\epsilon}_{22} = -\dot{\epsilon}_{11} = -\dot{\epsilon}_{33}, \\ \dot{\epsilon}_{13} &= 0 \pm 0.6 \dots 0.75, \dot{\epsilon}_{23} = 0 \pm 0.4, \dot{\epsilon}_{12} = 0 \pm 0.3 \dots 0.15 \end{aligned} \quad (2)$$

予測計算は、ランダムな方位分布を持つ 4000 個の結晶粒を元に、後述する圧延実験と同じ歪み速度と圧延率を与えて行った。得られた加工後の各結晶粒の離散方位から Orientation Distribution Function (ODF) を求めて集合組織を実験と比較すると共に、さらに後述の変態集合組織モデルに供した。

2.1.2 変態集合組織モデル

鋼においてある γ 相から析出した α 相との間には特定の結晶方位関係が成り立つことが知られており、その一つに Kurdjumov-Sachs (K-S) 関係がある。この関係は $\{111\}\gamma // \{011\}\alpha$ かつ $\langle 011 \rangle\gamma // \langle 111 \rangle\alpha$ で示され、変態前後の γ , α 相のそれぞれ最密面、最密方向が平行関係にあるものである。 γ 相、 α 相ともにその結晶構造は立方晶であるため、K-S 関係は 24 種類の結晶学的に等価な組み合わせ (バリエーション) を持つ。しかし、実際にはこれらのうち特定のバリエーションが優先的に選ばれるため、変態集合組織の定量予測には、このバリエーション選択則の導入が不可欠であることが知られている。本研究では近年提案され、低 C-Mn 鋼の変態集合組織を定量的に再現可能であることが報告されている二重 K-S 関係モデル (DKS) ^{8,9)} を変態集合組織の予測に用いた。

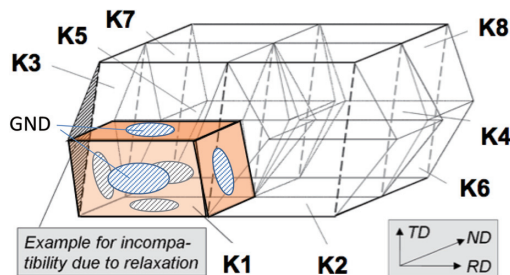


図1 GIA モデルにおける8結晶粒からなる Aggregate の模式図 ²⁾
8-grain aggregate described in the GIA model

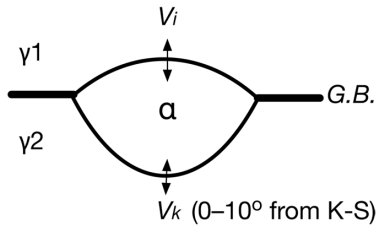


図2 DKS モデルにおける γ 粒界に析出した α 相の模式図
Schematic image of α nucleate on the γ grain boundary with double K-S relation

このモデルは図2に示すように、 γ の粒界上に α が核生成する際に、隣接する両方の γ 粒と K-S 関係に近い方位を持つようなバリエント（二重 K-S 関係にあるバリエント）が優先されるという仮定に基づいている。両方の γ と厳密に K-S 関係をもちうる粒界は極めて特殊な粒界に限られ、ほとんどそのような可能性はないが、少なくとも片側の α - γ 界面で約 10° 程度の K-S 関係からの乖離を許容すると DKS の仮定はどのような粒界でも実現し得る。

図2に示すように DKS に則って、あるバリエント i が片側の γ_1 - α 界面で選ばれるためには、これとは別のバリエント k がもう片側の α - γ_2 界面で成立している必要がある。つまり、 γ_1 からバリエント i を持って α が析出する確率は、 γ_2 の方位密度に比例する。これを関数として表現したのが(3)式に示すバリエント選択関数である。

$$\rho(g) = \frac{\omega}{N} \sum_k f(\Delta g^{-1} \cdot g_k^c \cdot \Delta g \cdot g) + \rho_c(g) \quad (3)$$

詳しく見ると、(3)式はバリエント選択関数が、DKS に沿って生じる部分（第一項）と、DKS 以外、ここではバリエント選択が生じない部分（第二項） $\rho_c(g)$ の和からなっている。ここで Δg は $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に伴う方位変化で、格子定数の変化を無視すると単純な回転行列で表現される。 g_k^c は立方対称性に基づく回転行列であり、 Δg と合わせてバリエントの変化を表現する。 ω は DKS 則の強さを決める定数で、本研究では実験によって得られた α の集合組織と、計算予測値が一致するように決定した。 N は考慮すべきバリエントの総数である。

一般に、集合組織は球調和関数展開によって(4)式の形で表すことができ、変態後の α に関する展開係数 ${}^a C_{\lambda}^{\mu\nu}$ は、(5)式のように変態前の γ 集合組織の展開係数 ${}^{\gamma} C_{\lambda}^{\mu\nu}$ と、バリエント選択係数 $\rho_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2}$ によって求めることができる¹⁰⁾。 $\dot{T}_{\lambda}^{\mu\nu}$ と $\dot{A}_{\lambda_1}^{\mu_1\nu_1}$ はそれぞれ結晶対称性を考慮した基底関数とその対称係数である。また、 $(\lambda_1 \lambda_2 m_1 m_2 | \lambda s)$ および $\{\lambda_1 \lambda_2 \nu_1 \nu_2 | \lambda \nu\}$ はそれぞれ Clebsch-Gordan 係数および Bunge ら¹⁰⁾によって基底関数の対称性を考慮して再定義された係数である。 $\rho_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2}$ は先に述べたバリエント選択関数 $\rho(g)$ をサンプル対称性を取り入れた基底関数 $\dot{T}_{\lambda}^{\mu\nu}$ で展開して得られる係数で(6)式のように表され、母相 γ の展開係数を含んだ形となっている。つまり、DKS モデルではバリエント選択則が変態前の γ 集

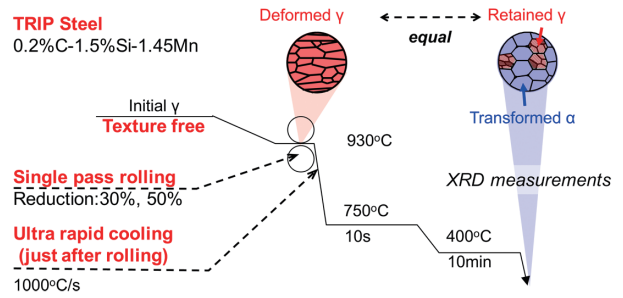


図3 単スタンド熱間圧延実験の模式図
Schematic representation of experimental hot-rolling

合組織そのものに左右されることを示している。

$$f_{\alpha}(g) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\lambda)} \sum_{\nu=1}^{N(\lambda)} {}^a C_{\lambda}^{\mu\nu} \dot{T}_{\lambda}^{\mu\nu}(g) \quad (4)$$

$${}^a C_{\lambda}^{\mu\nu} = \sum_{\lambda_1=0}^{\infty} \sum_{\mu_1=1}^{M(\lambda_1)} \sum_{\nu_1=1}^{N(\lambda_1)} {}^{\gamma} C_{\lambda_1}^{\mu_1\nu_1} \left[\sum_{\lambda_2=0}^{\infty} \sum_{\mu_2=1}^{M(\lambda_2)} \sum_{\nu_2=1}^{N(\lambda_2)} \rho_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2} \dot{A}_{\lambda_1}^{\mu_1\nu_1}(\lambda_1 \lambda_2 m_1 m_2 | \lambda s) \{\lambda_1 \lambda_2 \mu_1 \mu_2\} \dot{T}_{\lambda}^{\mu\nu*}(\Delta g) \right] \quad (5)$$

$$\rho_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2} = \frac{\omega}{N} \sum_{\mu_2=1}^{M(\lambda_2)} {}^{\gamma} C_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2} \left[\sum_k \dot{T}_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2}(\Delta g^{-1} \cdot g_k^c \cdot \Delta g) - \frac{1}{24} \sum_{i,k} \dot{T}_{\lambda_2}^{\mu_2\nu_2}(\Delta g^{-1} \cdot g_k^c \cdot \Delta g \cdot g_i^c) \right] \quad (6)$$

2.2 予測モデルの検証

予測モデルの定量性を検証するために、以下に示すような実験室熱延実験を行った。まず重量%で 0.2%C-1.5%Si-1.45%Mn の化学成分を含有する鋼を真空溶解炉によって溶製しインゴットを得た後、圧延と熱処理によって、ODF のランダム強度比で最大 1.2 倍程度の実質的に集合組織の発達がない 4.9mm および 6.8mm の素材鋼板を得た。

上記の素材鋼板を N_2 ガスパージした 1000°C の雰囲気炉に 1 時間投入し、図3に示すように炉から抽出後にそれぞれ 30% および 50% の単スタンド圧延を施して 3.4mm の熱延鋼板とした。仕上げ圧延温度は 930°C とし、圧延機直後に設置された強冷却装置を用いて圧延後直ちに 1000°C/s で冷却を行って再結晶を抑制した。フェライトを析出させるため、冷却を 750°C までで一旦停止し、続いて 10 秒の空冷を施した。その後、再び 40°C/s で 400°C まで冷却し、その温度で 10 分間の保持を行って残留 γ を安定化させた。

得られた組織の一例を後方散乱電子回折法 (EBSD) で解析した結果を図4に示す。組織は 8% 程度の未変態 γ とフェライト、ベイナイトおよび若干のマルテンサイトから構成された。

得られた熱延鋼板の板厚中心を切り出して、X 線回折法 (XRD) によって BCC と FCC の不完全極点図を採取し、これらから級数展開法¹¹⁾により ODF を計算して集合組織を調べた。

本研究では、残留 γ の集合組織が、変態前の熱間圧延 γ のそれと一致すると仮定して、予測計算の検証に用いた。

2.3 モデル検証実験の結果および考察

2.3.1 加工集合組織の予測シミュレーション

図5に30%熱延材について実験とGIAによる予測計算で得られた γ 集合組織をODFで比較した結果を示す。実験で得られた γ 集合組織は、冷間加工によって得られる典型的な純銅の加工集合組織と類似しており、残留 γ から得た集合組織は、変態前の γ 集合組織とほぼ合致していることを示唆している。これらより、最密面に加えて非最密面のすべりを導入した予測計算は、実験で得られた熱間圧延集合組織を良く再現していることがわかる。

さらに図6は圧延率の異なる熱延鋼板の集合組織について、 ϕ_2 に沿った β -fiberの強度プロファイルによって実験と計算予測値で比較したものである。実験値、計算予測値ともに、圧延率の上昇につれて、全体的に集合組織の発達が認められるが、計算予測値のうち、最密面すべりのみを考慮した場合には、何れの圧延率においてもS方位からCu方位にかけて極めて高い強度の集積が認められ、実験との乖離が大きい。

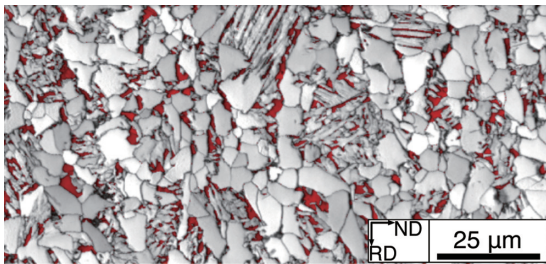


図4 50%熱間圧延材の金属組織のEBSD解析像²⁾
赤色部は残留 γ 相であることを示す

Phase map of the steel sheet after 50% hot-rolling and transformation
Red filled area corresponds to the retained γ phase.

一方、最密面に加えて非最密面すべりを考慮すると、最密面のみを仮定した場合と比較してCu方位近傍の過大な強度集積が抑制され、実験と比較的良好一致が得られることがわかる。

現時点では圧延率が高い場合には依然として実験よりやや強いCu方位への集積を見積もるが、CuならびにBrass方位は非最密面すべり系のCRSSに比較的強く依存することを知見しており、今後これらのCRSSについて検討を加えることで定量性についてより一層の進歩が期待できるものと考えている。

以上のようにして得られた加工 γ の集合組織を次に示す

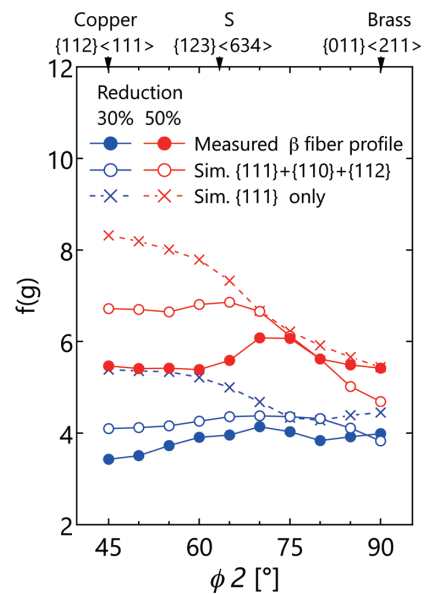


図6 実験および計算集合組織における β -fiber強度プロファイルの比較²⁾

Comparison of the β fiber intensities between the measured and the simulated textures

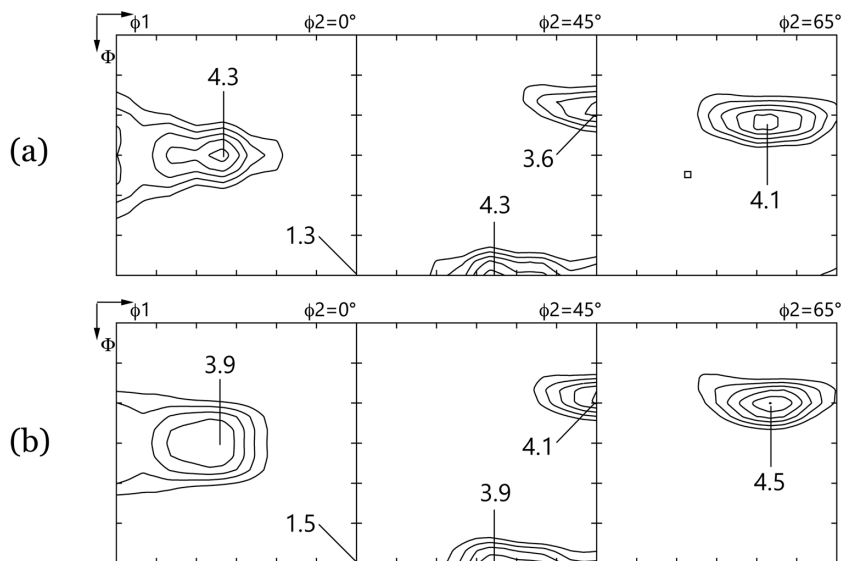


図5 30%熱間圧延材の (a) 実験および (b) 最密面と非最密面すべりを考慮した計算予測による加工 γ 集合組織のODF等高線図²⁾
(a) Measured ODF of the retained γ hot-rolled by 30% in reduction and (b) Predicted textures with octahedral and non-octahedral slip system

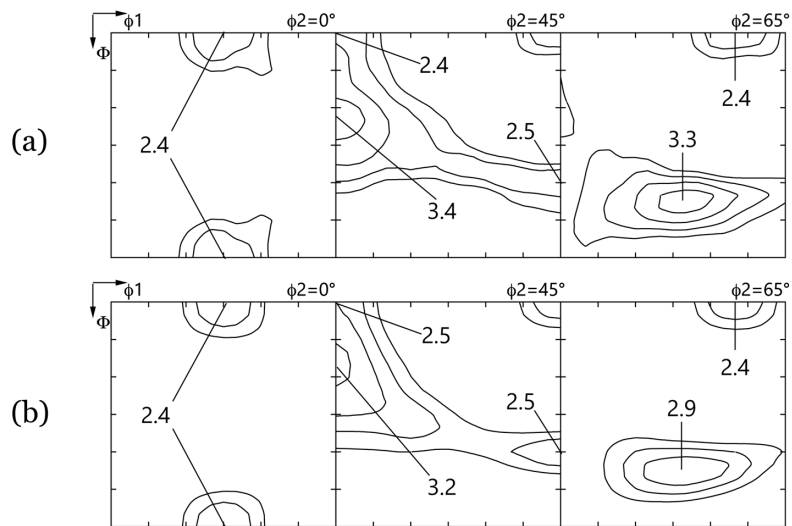


図7 30%熱間圧延材の (a) 実験および (b) 最密面と非最密面すべりを考慮した計算予測による加工 γ 集合組織を母相として予測した α の変態集合組織の ODF 等高線図²⁾

(a) Experimental textures of the transformed α in hot-rolling steel sheet of 30% reduction, and (b) Prediction by the linked simulation of GIA and DKS. (levels: 1.5, 2.0, 2.5 ...)

変態集合組織モデルの母相として用いた。

2.3.2 連成予測モデルによる加工-変態集合組織シミュレーション

図7(a)に実験によって得られた α 集合組織の ODF を示す。 $\phi_2=45^\circ$ 断面上に現れる α -fiber (RD// $\langle 110 \rangle$) 中の $\{112\} \langle 110 \rangle \sim \{113\} \langle 110 \rangle$ 方位を主方位とする集合組織で、未再結晶 γ からの変態集合組織であることを示しており、前述の実験ないしは計算予測が示した加工 γ 集合組織と矛盾しない。

先に求めた図5(b)に示す加工 γ 集合組織を母相として、DKS モデルによって計算予測した α 集合組織を図7(b)に示す。これからわかる通り、GIA-DKS 連成モデルは実験で得られた加工-変態後の α 集合組織を極めて良く再現する。

上記の予測に際し、(3) 式中の定数 ω について、各方位の実験値と連成予測モデルによる計算集合組織の差の二乗平均平方根が最小となるように決定し、 $\omega=0.8$ を得た。

また、図8は BCC α -fiber において集合組織の主方位近傍の強度を実験と計算を比較したものである。これからまず、バリエーション選択を考慮しない計算から導かれる変態集合組織は、実験と比較して弱く、変態集合組織の定量予測にはバリエーション選択則が不可欠であることを示している。

一方で、非最密面を考慮しない GIA と DKS の連成計算結果は、実験と比較して強い α -fiber を予測する。この実験との不一致は、非最密面を考慮しない場合に、計算による加工 γ 集合組織に生ずる Cu 方位への過剰な集積によるものである。

前述のように熱間加工を鑑みた非最密面すべりの導入は、このような Cu 方位強度の過大集積を抑制する効果が

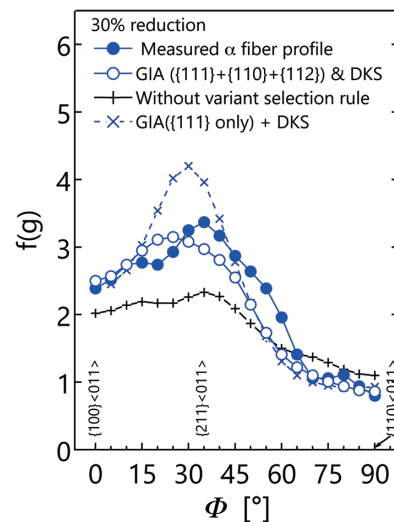


図8 実験および計算集合組織における α -fiber 強度プロファイルの比較²⁾

Measured and the simulated profiles of the BCC α fiber

ある。特に、 $\{112\} \langle 110 \rangle$ 系の非最密面すべりに関する CRSS 値は、Cu ならびに Brass 方位密度に比較的強い影響を及ぼすことから⁴⁾、モデルの定量性を向上するにはこれらの CRSS の値を正しく与えることが今後重要と考えられる。(6) 式に示したように、DKS モデルの下では、バリエーション選択そのものが母相 γ 集合組織に左右されるため、熱間圧延-変態集合組織の連成モデルの精度をより一層向上するには、熱間加工 γ 集合組織の定量予測精度の向上が重要である。

3. 結 言

熱延鋼板の加工-変態集合組織を定量的に予測可能な連成モデルの開発に取り組んだ。本研究では、隣接粒の変形

相互作用を考慮した結晶塑性モデル GIA に、非最密面すべりを導入することで、熱間加工 γ 集合組織を定量的に予測可能であること、さらにその結果をバリエーション選択モデル DKS と連成させることで加工 - 変態後の α 集合組織のより定量的な予測を実現した。これらの結果は、さらに加工 γ 中の再結晶モデルとの連携により、熱間圧延中の集合組織一貫予測の可能性を示唆するものである。

数値計算による集合組織予測には本研究で示した統計学的手法の他、位置情報等のローカルな結晶方位や組織変化を捉えることのできるより詳細なモデルも存在する^{12,13)}。一般的に詳細モデルは計算負荷が高く、サンプル全体の組織を予測することは、現時点では難しい。しかし統計モデルでは捉えられない局所方位変化の追跡やそれに基づいたメカニズムの理解に有効であることから、双方のモデルがそれぞれ持つ優位性を活かしつつ、一貫集合組織予測モデルの発展に取り組んでいく。

参考文献

- 1) Gottstein, G. et al.: Materials Science Forum. 519, 93 (2006)
- 2) Tanaka, Y. et al.: Materials Science and Engineering. 82 (1), 012057 (2015)
- 3) Crumbach, M. et al.: Proc. First Joint Int. Conf. Recrystallization and Grain Growth. 1, 2001, p. 1053
- 4) Bacroix, B. et al.: Textures and Microstructures. 8, 267 (1988)
- 5) Maurice, C. et al.: Advanced Engineering Materials. 45 (11), 4639 (1997)
- 6) Pérocheau, F. et al.: International Journal of Plasticity. 18 (2), 185 (2002)
- 7) Engler, O.: Advanced Engineering Materials. 4 (4), 181 (2002)
- 8) Tomida, T. et al.: Materials Processing and Texture. 200, 325 (2008)
- 9) Tomida, T. et al.: Acta Materialia. 61 (8), 2828 (2013)
- 10) Bunge, H. J. et al.: Scripta Metallurgica. 17 (12), 1403 (1983)
- 11) Bunge, H. J.: Quantitative Texture Analysis. London, Butterworths, 1982
- 12) Suwa, Y.: Computational Materials Science. 44 (2), 286 (2008)
- 13) 諏訪嘉宏 ほか: 材料とプロセス. 28, 891 (2015)



田中泰明 Yasuaki TANAKA
先端技術研究所 基盤メタラジー研究部
主幹研究員
兵庫県尼崎市扶桑町1-8 〒660-0891



富田俊郎 Toshiro TOMIDA
日鉄住金テクノロジー(株)
尼崎事業所 統括主幹 博士(工学)