非対称格子セルオートマトンによる実用形状での炭化物析出形態の予測手法

研究代表者　旭川工業高等専門学校 機械システム工学科　准教授　杉本 剛

1. 緒言

自動車車両の電動化(EVx)が進み電動動力はもはや小型の特殊な電気自動車のものではなく，高級車，貨物車，二輪車へも波及しつつある．電動動力の広範への普及に伴いその動力を伝える駆動系ユニットは図 1 に示すように複雑化が進み[1]駆動系材料への要求はかつてなく高まっている．これら駆動系部品，特に歯車の構造材料はピッチング疲労，曲げ疲労や衝撃疲労等の多種の特性に同時に対応する必要がある．このため歯車の部品設計では鋼材単体だけではなく部品製造プロセスも含めた性能向上が，歯面，歯元，軸部ねじり等，部品機能部位毎に行なわれる．歯車部品強度を造りこむ製造プロセスとして 2000 年代以降，制御性の高い減圧浸炭(真空浸炭と呼ぶ場合もある)の普及が進んだ．しかしその浸炭理論，特に中間生成物であるセメンタイトの生成原理に対する解明は十分とは言えず，減圧浸炭を活かした部位毎に最適な部品機能設計手法がなく，減圧浸炭は部品の機能向上に活用されていない．

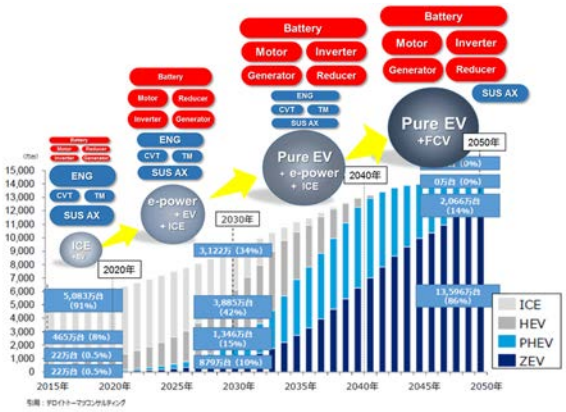


図 1　駆動系ユニットの複雑化の展望

ここで，従来この分野で部品機能設計手法が実用化されていなかった理由として，①金属組織の形態，②部品の形状，③部品変形等の副次的な影響を考慮できない事が課題であった．本研究ではこれら課題を以下の手法で解決した．

減圧浸炭では旧来のガス浸炭と違い，雰囲気との平衡反応ではなく，表面での中間生成物形成による速度論反応が特徴とされる[2]．しかしながら現状で市場に供されているこれら減圧浸炭の品質予測シミュレーションでは，これら中間生成物の組織学的な形態(モルフォロジー)を無視し，単に存在率の媒介物質変数として取り扱っていたため，最終品質として浸炭炭素濃度や硬さの予測は行えるが組織制御はできないレベルであった．これらにより，減圧浸炭を高強度歯車の製作に使う場合，特に歯先の網状セメンタイトの生成による脱落，平面部での析出強化予測の不可，部位毎の炭素濃度最適化不可，鋼材を変更した際の熱処理変形量過大等，実際にものを造ってみないと品質懸念が分からないという問題があり，製品開発期間を長大なものとしている．

本研究ではこの様な減圧浸炭での中間生成物について経時の形態学的な織込みを行い，

金属組織を含んだ材料・プロセス・部品設計を行う為の設計ツールを提供し，開発期間を短縮することで種々高強度部品製造業の競争力を向上することを目的とする．

このような形態学的な考慮においては従来からフェーズフィールド法や第一原理計算といったミクロな分子，原子クラスターレベルの拡散の予測手法が提供されてきた[3]．しかしながらフェーズフィールド法で取り扱う数 nm レベルのごく微小な領域と，部品全体の数 μm-cm レベルの形状では取り扱う現象のスケールが違い，両者にまたがった品質予測は計算機負荷の面で不可能であった．本研究ではこのような微細な現象と大きな現象を実験的に検証し，よりマクロなシミュレーションを構築すること，マクロなシミュレーションとミクロなシミュレーションを重ね合わせることで組織学的な情報を含む浸炭+析出シミュレーションを実現することにより低負荷で浸炭時の析出組織を予測することを目的とする．

また，このような中間生成物，特にセメンタイトを商品性能向上に用いる場合，従来に較べ精密な形状制御が必要になるため，部品を集団処理した場合の品質のバラツキも課題となってくる．これは，プロセス中の加熱・冷却における中間生成物の形態変化，処理雰囲気のバラツキによる中間生成物量・形態の違い等に起因する．よって，本研究で取り扱うような高度な減圧浸炭シミュレーションを行う場合，より巨視的な処理雰囲気，冷却・加熱媒体の流れ等の解析も必要となってくる．しかしこれら数 m レベルの現象も前述のフェーズフィールドと部品全体の現象のスケール違いと同様にスケール差が大きく同時に取り扱うのは困難である．この場合，実際に必要な結果は製品の品質ばらつきであり，全体の現象は統計的シミュレーションで取り扱えば十分である．雰囲気・温度分布をモンテカルロシミュレーションによって統計的に取り扱う手法により，より高精度な品質シミュレーションを実現することができる．このような取り扱いをするためにもより低負荷な組織形成シミュレーションが必要となってくる．

以上の様に本研究では，図 2 に示すように減圧浸炭シミュレーションの高度化に伴う懸念について諸現象をマルチスケールで取り扱い，かつスケールによりシミュレーションスキームを変更することにより，従来不可能であった，組織学的な，バラツキを含む品質予測に向け，電動化時代に対応できる材料から製品特性までを予測可能な設計手法を提供する．

これにより例えば歯車においては図 3 に示すように歯先，歯面，歯底の部位別に金属組織を変えて造りこんだ従来にない高性能な歯車を実現，またその生産条件を導出することができるようになる．また，材料・製造条件にまたがった品質予測シミュレーションが可能になるため, 図 4 に示すように材料･新工法の採用にかかるプロセスが大幅に短縮でき，材料とプロセスを連携した複雑条件での商品機能向上が進むと考えられる．

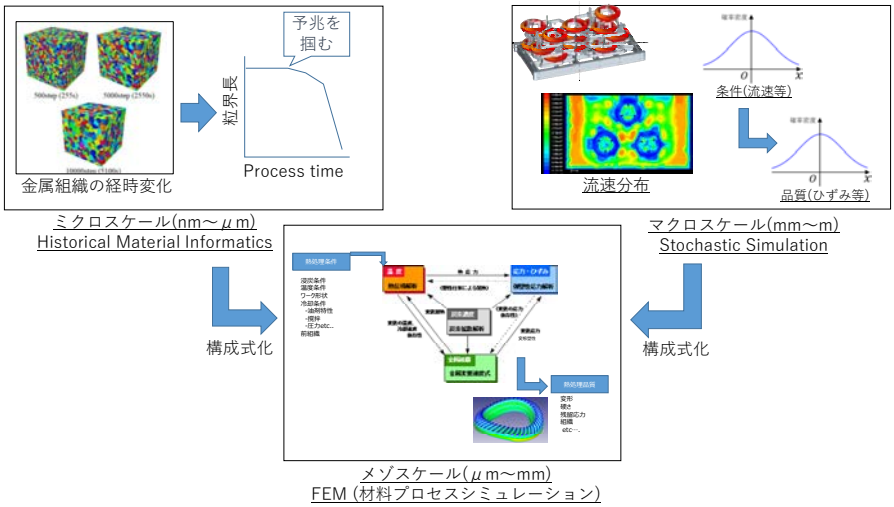


図２　本研究で構築する材料プロセスシミュレーションの姿

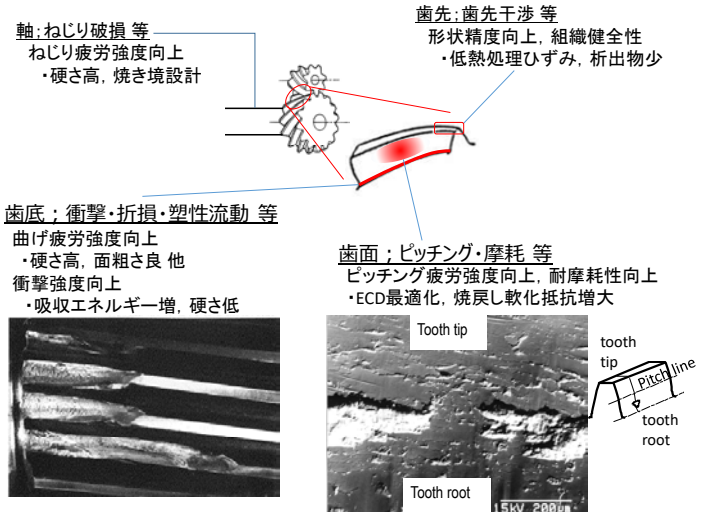


図３　本研究で実現する品質

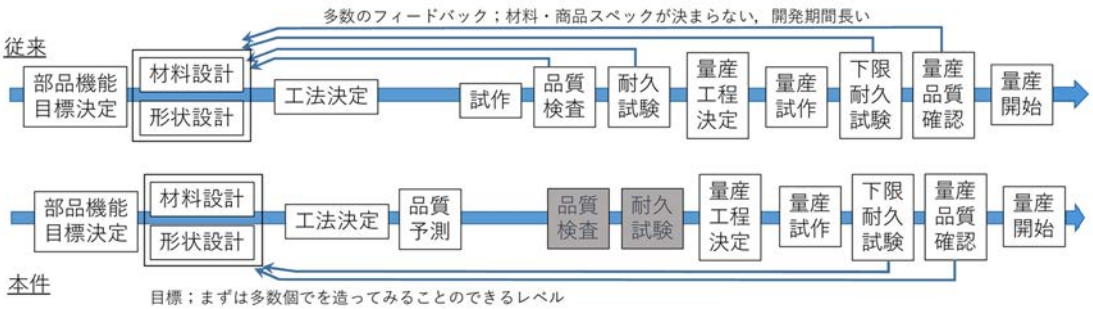


図４　本研究で実現する材料・プロセス・部品開発プロセス

2. 減圧浸炭の効果

一般的に電動機(モーター)は高回転で運転することで単位体積当たりの出力を向上させることができる. また, EVx による自動車の駆動力の変化の中でも特に PureEV(純電動車)においては高出力・高加速が商品性につながるプレミアムセグメントの車両が多いためモーターの高回転化要望が顕著である. 歯車回転数の高回転化を行うと図 5 に示すように歯車歯面におけるフラッシュ温度(θ_{fla})が上昇し，これにともないインテグラル温度(θ_{int})が上昇し，材料が焼戻し軟化することで歯面のピッチングが懸念される.

$$\theta_{fla} = 0.83\mu P \frac{|V_1 - V_2|}{\sqrt{\lambda \rho c b_H}\left(\sqrt{V_1} + \sqrt{V_2}\right)} \quad \cdots \text{式(1)}$$

$$\theta_{int} = \theta_M + C\theta_{fla} \quad \cdots \text{式(2)}$$

μ: *摩擦係数*, P: *有効接触幅あたりの法線荷重*

λ: *熱伝導率*, ρ: *密度*, c: *比熱*, b_H: *ヘルツ接触幅*, C: *係数*

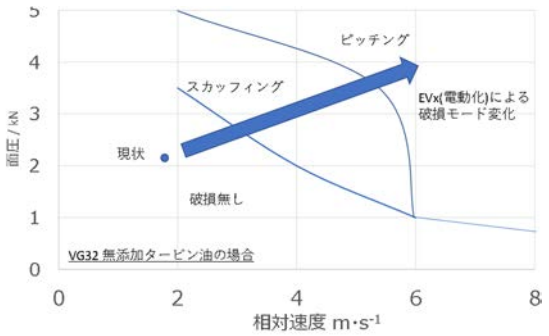


図 5　EVx による歯車破損モードの変化

歯車用鉄鋼部材の耐ピッチング性を対応するためには運転環境下の高温での材料劣化を防止するため，焼戻軟化抵抗を向上させる必要がある．図 6 に示す様に焼戻軟化抵抗の向上には材料に高強度化をする合金元素や強化元素の窒素や炭素を大量に投入することに加え，高硬さ析出物であるセメンタイトを活用することも一方策となる.

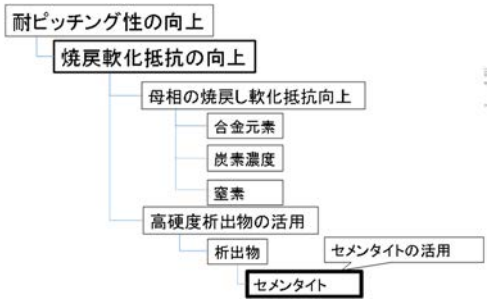


図 6　耐ピッチング性向上に関連する材料因子

3. 減圧浸炭をした際の炭化物形状の把握

高硬さのセメンタイトを析出する工法は一般に高濃度浸炭もしくは過共析浸炭と呼ばれることが多い．図 7 に高濃度浸炭の効果と，その課題について示す．炭化物を析出させた際，その析出形態によってはセメンタイトの角部に応力集中が起き，硬さは硬いが引張等の応力がかかった際に破壊が起き，強度・疲労寿命の低下を招くことになる．

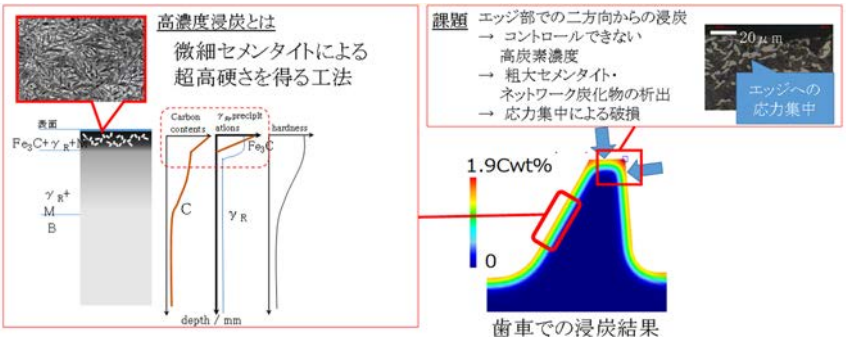
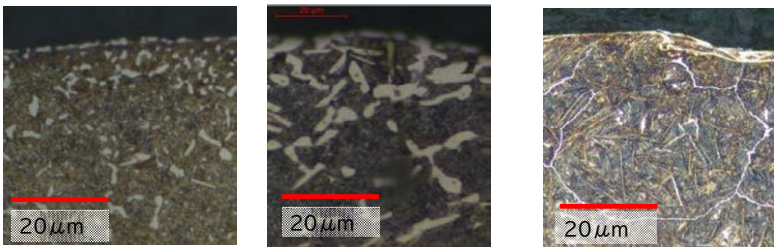


図 7　セメンタイトの活用とその課題

炭化物の析出形態の予測に先立ちどのような炭化物析出形態があるのか，種々の形状のテストピースに高濃度浸炭をし，析出形態の確認を行った．結果を図 8 および図 9 に示す．図 8 は平面部で浸炭条件を変更したもので，供試鋼材は JIS SCr420H 材 □10mm x t=5mm 試験片であり，表面炭素濃度の最終での表面炭素濃度狙い値を 1.1wtC%となるようにし，1050℃にて 20 分の浸炭のアセチレン浸炭の後，15 分間の拡散処理，その後 N_2 ガス焼き入れを行っている．(i), (ii), (iii)はそれぞれアセチレンを連続で流す時間を 30 秒，60 秒，90 秒としている．写真を見ると(i)では白い粒であるセメンタイトは特定の部位を囲むように分布しているが，各々の粒は分断しており粒状セメンタイトといえる．(ii)では粒状セメンタイトは大きくなり一部で粒同士が連結することにより網状になっている．(iii)ではセメンタイトはネットワークを形成している．これら結果より，セメンタイトは浸炭時に発生する旧オーステナイト粒界に生成することで，条件によりネットワークを形成することがわかる．



(i)分断した
粒状セメンタイト

(ii)過剰炭素濃度によって
発生した粗大セメンタイト

(iii)粒界に発生した
網状セメンタイト

図 8　種々のセメンタイト析出形態

試験片の形状による効果を見るため，120°エッジ部を持つ試験片に前記 60 秒条件で浸炭した結果が図 9 である．図 9 左側は低倍率で，右側は高倍率である．低倍率で見た際のセメンタイト分布をみるとある一定の炭素濃度を超えた領域にセメンタイトが分布していることが明瞭にわかり，特に両面からセメンタイトが浸入するコーナー部ではセメンタイト発生深さが深くなっていることがわかる．一方で図 9 右側を見るとその中には粒界の影響を受けた形態を持つセメンタイトが発生していることがわかる．

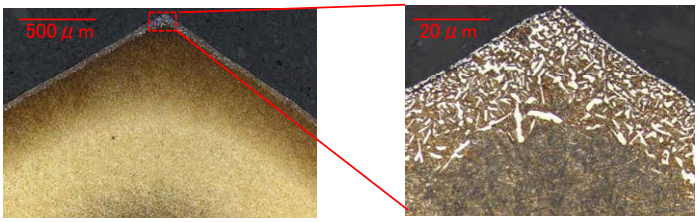


図 9　エッジ部での高濃度浸炭によるセメンタイト析出

以上より，実用形状での炭化物析出形態を行うには，浸炭時の炭素濃度がある一定の濃度を超えるとセメンタイトが析出するバルクの炭素濃度-析出シミュレーションをした上で，その領域の中にどのような旧オーステナイト粒界が発生しているかを予測し，その粒界にセメンタイトが発生するという手順で解析を行わないといけない．その流れを図 10 に示す．

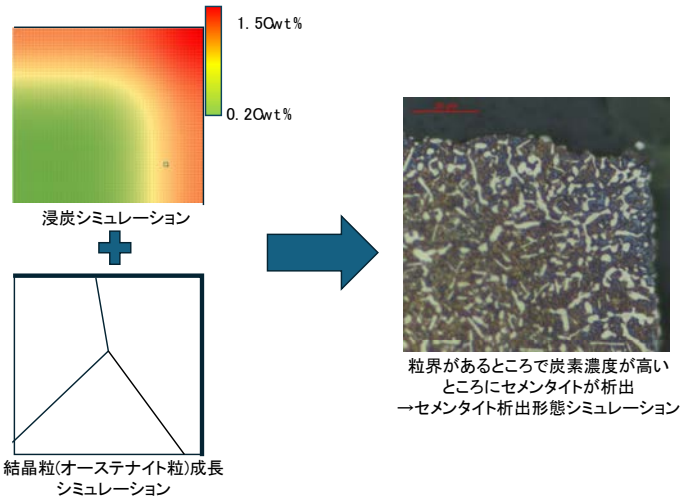


図 10　実用形状での炭化物析出形態シミュレーション

4. 実験方法

図 10 に示すシミュレーションの流れをそれぞれ検証するため，図 12 の様な流れで実験・シミュレーションを行った．対象にする熱処理条件は図 11 のとおりである．アセチレ

ンを用いた真空浸炭を行い，浸炭ガスが流れていないときの雰囲気のパージは真空引きのみとした．ガス流入時の雰囲気圧力は 800Pa に制御した．

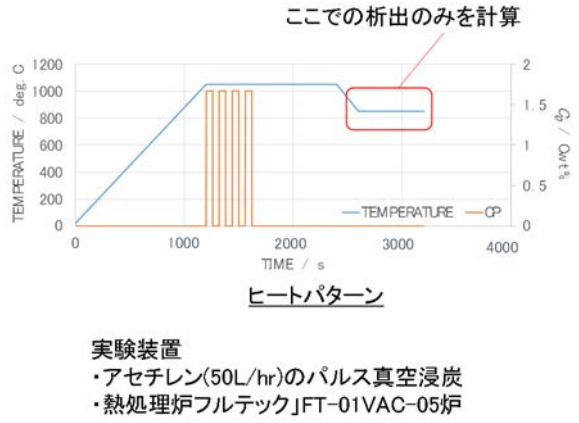


図 11　本研究で用いた熱処理条件

本実験条件に対し，図 12 に示す流れでシミュレーションと実験の相関を調査し，シミュレーションが正しくできているかを検証した．

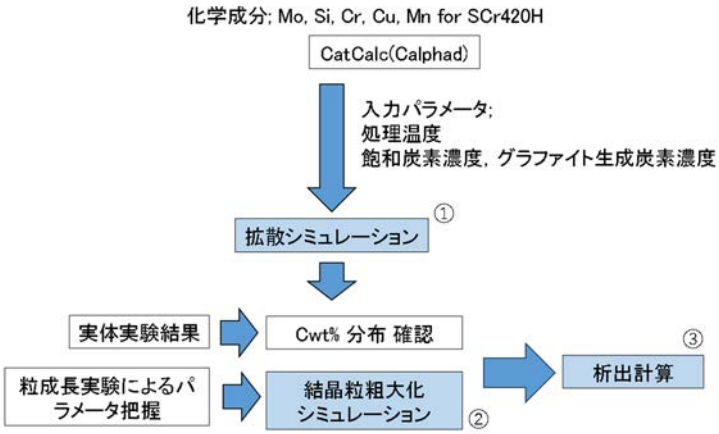


図 12　解析と実験の流れ

5. 実験方法

5.1.　拡散シミュレーション

高濃度浸炭をしたのちの炭素濃度を評価するため，真空浸炭条件について浸炭シミュレーションを行った．従来，減圧浸炭条件に対しては実体形状を反映したシミュレーションはなされていなかった．本研究では森田ら[2]の研究結果を参考に，CatCalc®を用いて表面の炭素濃度を推定し，この条件を元に有限要素解析を行い炭素濃度分布を推定した．推定した表面炭素濃度を図 13 に，計算した炭素濃度分布と，実測結果の比較を図 14 に示す．炭素濃度分布は極表面において実測値が高くなっていることを除くとよく一致した．これにより実体形状での減圧浸炭シミュレーションは精度良く実施できたといえる．

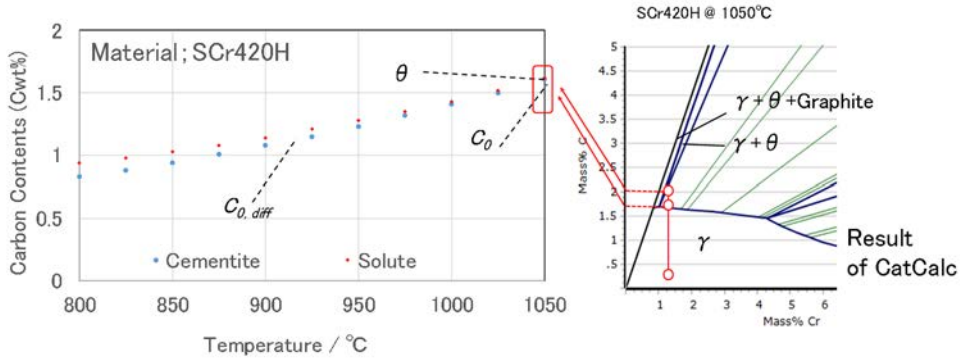


図 13　減圧浸炭時の表面の炭素濃度推定

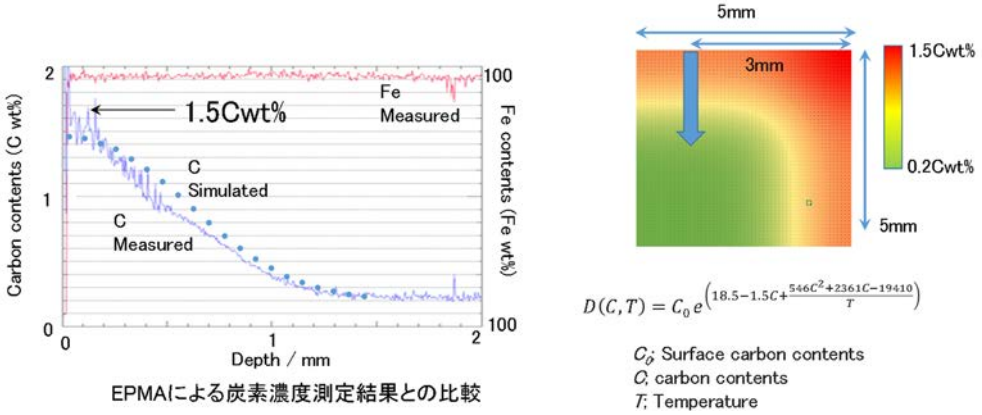


図 14　炭素濃度の実測結果と計算結果の比較

ここで極表面における炭素濃度測定値の乖離は有限要素解析における格子密度の問題による離散化誤差，EPMA 測定における表面効果などが考えられるが本研究の範囲では検証できておらず，今後の調査が必要である．

5.2.　結晶粒成長シミュレーション

結晶粒成長の状況を予測するには結晶粒が成長する条件を見極める必要がある．オーステナイト結晶粒の成長には熱処理前に付与されていたせん断ひずみと，熱処理温度が影響するといわれている．本研究では図 15 に示すように HPT200 型ねじり試験機を用い，試験片にせん断ひずみを付与した後，熱処理，焼入れをすることで旧オーステナイト粒がどのように成長したかを確認し，結晶粒成長シミュレーションに必要なパラメータを調査し

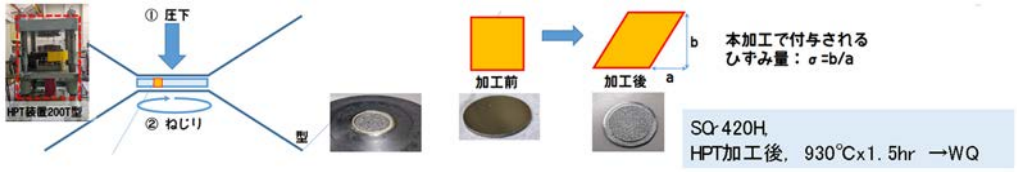


図 15　HPT 加工と熱処理の条件

た．結果を図 16 および図 17 に示す．これより，熱処理温度が高くせん断ひずみが多くなると結晶粒が大きくなることがわかる．また，図 17 を見ると結晶粒は平均して大きくなるのではなく，一部の結晶粒が極端に大きく成長をしていることが見て取れる．

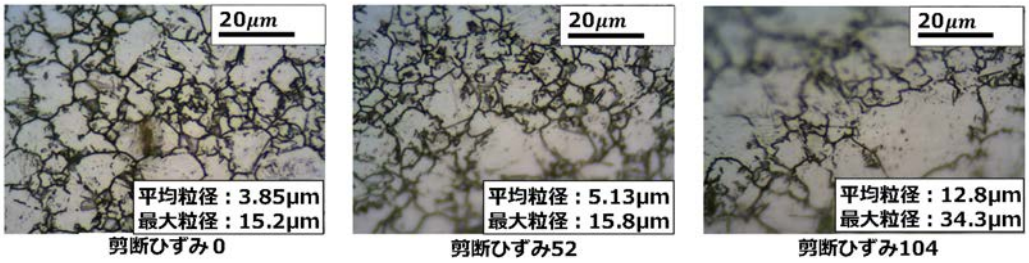


図 16　結晶粒成長の様子

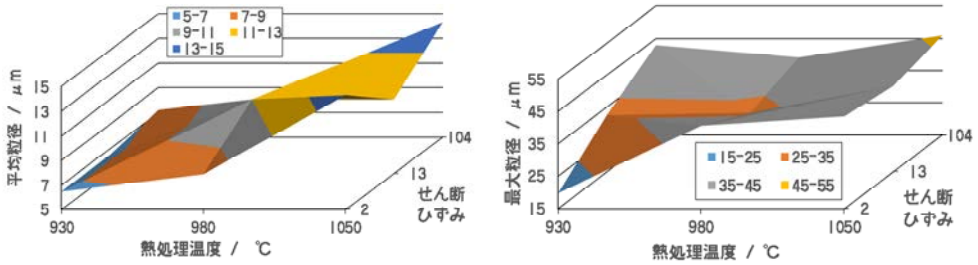


図 17　平均粒径と最大粒径の変化

この結果を受け，初期結晶粒界を生成した上でその結晶粒が成長していくシミュレーションを実施した．前述の結果のもとひずみ 0, 930℃では結晶粒が粗大化していないとし，490μm²/個の粒密度とした上で，乱数で座標を発生させ結晶粒中心を配置した．その様子が図 18 左側である．粒中心での粒界存在確率をゼロとし，離れるにつれ粒界の存在確率が高まるように確率分を設定し，存在確率の稜に結晶粒があるものとした．生成した結晶粒の配置を図 18 右側に示す．これにより成長前の初期結晶粒の形態を生成することができた．

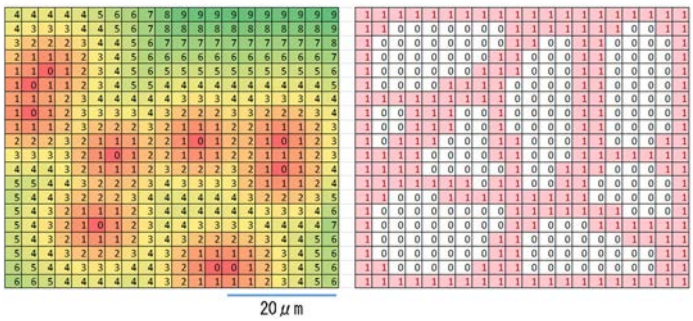


図 18　初期結晶粒の配置

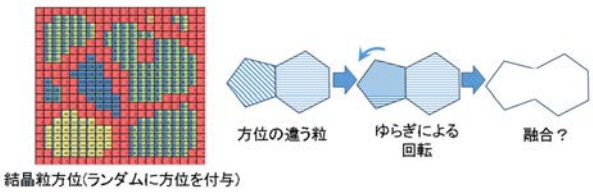


図 19　高温下における結晶粒融合メカニズム

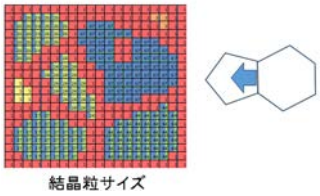


図 20　結晶粒界移動メカニズム

配置した結晶粒を元に成長を予測する．成長するメカニズムについては以下の 2 つを仮定した．第一は図 19 に示すような結晶粒の回転メカニズムである．高温顕微鏡で 1050℃下で結晶粒の変化を観察した際，結晶粒が融合する様子が見られたため，山中[4]による粒界移動と粒回転のフェーズフィールドクリスタルシミュレーションのメカニズムを用い，粒の方位が常に揺らぎ，隣り合う粒の方位が一致すると粒が融合するとした．この場合，結晶粒には方位の情報が必要となるため，乱数で方位を発生させ，図 19 の様に各結晶粒に方位を付与した．第二は大きな結晶粒が小さな結晶粒を侵食するメカニズムである．図 20 に示すように各結晶粒のサイズを計算し，大きな結晶粒側から小さな結晶粒側に結晶粒が移動するとした．計算した結晶粒のサイズについても図 20 に示す．両者のメカニズムをともに織り込んで結晶粒成長を計算した結果を図 21 に示す．もっとも右側の結果が成長後の結晶粒の形態を示している．実際に肌焼鋼を結晶粒粗大化させた場合，通常の球形をした結晶粒のみならず異形をした結晶粒が多くみられるが，本シミュレーションにより異形の結晶粒が再現できたため，本手法は実際の高温熱処理で多く見られる異常結晶粒成長やそれに伴う異形の結晶粒を再現できているものと考える．

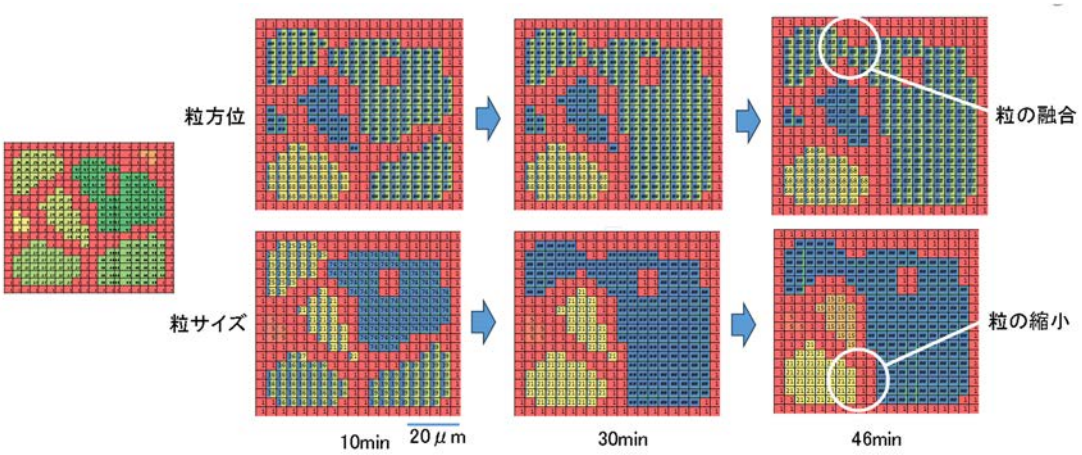


図 21　結晶粒成長計算結果

5.3.　セメンタイト析出シミュレーション

これまでの炭素濃度予測結果と粒界予測結果を用いセメンタイトの析出を予測する．新

井ら[5]によるとステンレス鋼においては粒界では炭化物析出速度が速く，粒内では遅いことが報告されている．これにより，炭素濃度が高く，粒界であればセメンタイトの存在確率が高く，粒内であればセメンタイトの存在確率が低いとした．これにより図 22 に示すようにセメンタイトの存在位置を予測することができた．この結果を実験結果と比較したものを図 23 に示す．炭化物の存在位置を計算できてはいるが，粒内の析出量が少なく見えること，表面のセメンタイトがシミュレーションでは被覆上に計算されており，実際には存在していないこと，結晶粒サイズが実験とシミュレーションで異なっているように見えること等，相違がみられた．

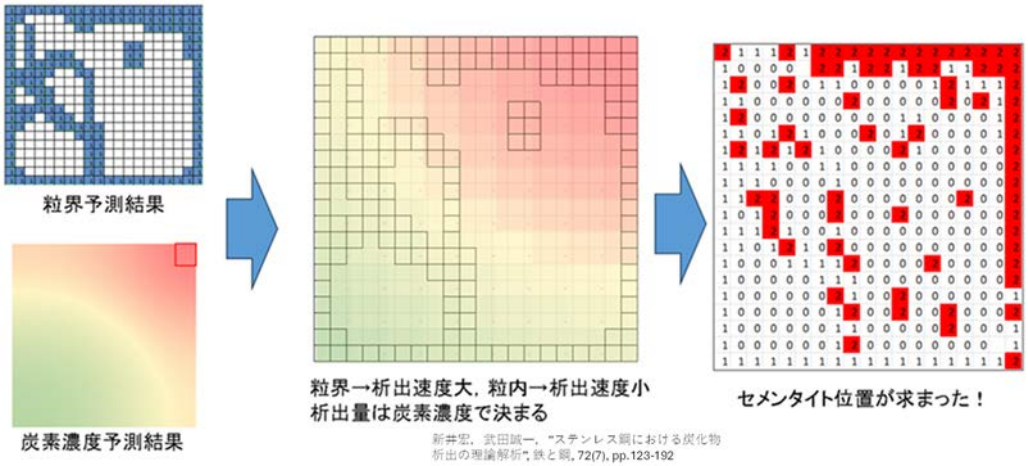


図 22　セメンタイト位置予測シミュレーション結果

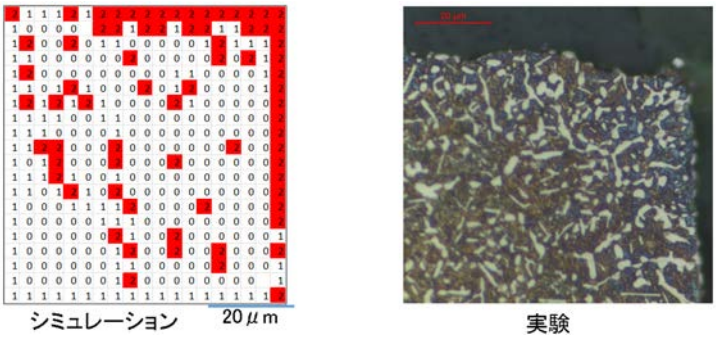


図 23　セメンタイト位置予測のシミュレーション実験比較

6. 考察と結論

浸炭シミュレーションをベースとしてセメンタイト析出形態予測手法を構築した．その中では粒成長，粒回転を仮定し結晶粒成長予測を行うことができた．この中では炭素濃度の予測について定量的な一致をみて，ネットワーク炭化物の形成の予測もできたが，実物に比較しスケールが異なっていたり，粒内・粒界析出・表面析出があっていないといった乖離も見られている．

これらの乖離は実際の処理結果とシミュレーション結果を比較し，計算パラメータを修正していくこと，一致について比較するための定量的な指標の定義も必要になってくる．

7. 今後の課題

炭化物ができたあと，拡散する計算も必要である．また結晶粒成長のパラメータ修正，浸炭中析出に関しても検討を進める．EBSD 観察等の実態観察により，浸炭焼入時の粒回転を証明する．

謝辞

本研究は，公益財団法人 JFE21 世紀財団の助成を受けたものです．関係各位に謝意を表します．

参考文献

[1] 杉本剛，浸炭熱処理品質・ひずみとシミュレーション技術，日本熱処理技術協会 第 4 回熱処理セミナー講演資料，2019

[2] 森田敏行，羽生田智紀，浸炭機構に基づく真空浸炭材の炭素濃度分布予測，鉄と鋼，92(4), 268-273, 2018

[3] 藤山直人，西畑敏伸，関彰，平田弘征，小川和博，溶接熱影響部におけるオーステナイト粒成長シミュレーション，新日鉄住金技報, 409, 96-101, 2017

[4] 山中晃徳，粒界移動と粒回転のフェーズフィールドクリスタルシミュレーション，日本機械学会〔№16-4〕第 29 回計算力学講演会 CD-ROM 論文集, 2016

[5] 新井宏，武田誠一，ステンレス鋼における炭化物析出の理論解析，鉄と鋼. 72(7), 831-838