

# Phase Field Crystal法によるナノ結晶体の変形特性解析

## Deformation Analysis of Nanocrystalline Metal Using Phase Field Crystal Method

○ 学 廣内 智之 (神戸大・院) 正 高木 知弘 (京工織大・院)  
正 富田 佳宏 (神戸大・院)

Tomoyuki HIROUCHI, Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501  
Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Science and Technology, Kyoto Institute of Technology  
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University

**Key Words** : Phase Field Crystal Method, Multi Scale Model, Nanopolycrystalline Metal, Plastic Deformation

Phase Field Crystal(PFC) 法は、拡散時間スケールで原子構造に起因する物理現象を再現可能とすることから、新たなマルチスケール手法として期待されている。PFC 法は、様々な現象に適用されてきたが、変形問題に適用する際、境界条件の設定が困難とされ、これまで金属材料の体積一定の塑性変形を再現できていない。本研究では、体積一定の塑性変形を再現するために差分格子の大きさを変化させる新たな変形解析手法を提案する。本手法を用いて、異なる粒径のナノ多結晶体の引張り変形シミュレーションを行い、変形挙動に対する粒径依存性の影響を評価する。

### 1 緒言

工業用材料の物理化学的な特性は、材料の微視組織内に存在する欠陥に強く影響されることが知られている。そのため、材料の更なる高機能化および新機能発現のためには、材料の微視組織に依存する巨視的な材料特性評価を可能とする数理モデルの構築が必要不可欠である。Phase Field Crystal(PFC) 法<sup>(1)</sup>は、拡散時間スケールで個々の原子に起因する物理現象を再現可能とすることから、連続体力学と分子動力学法を繋ぐ新たなマルチスケール手法として期待されている。一般に、金属材料の塑性変形は材料の体積が一定の状態で行われるが、これまでの PFC 法を用いた多結晶体のシミュレーション<sup>(1)(2)</sup>では、体積一定の塑性変形を再現できていない。

そこで、本研究では、体積一定の塑性変形を再現可能とする差分格子を制御する変形手法を提案する。提案した手法を用いて、異なる粒径のナノ多結晶体を用いて変形シミュレーションを行い、変形挙動に対する粒径依存性を評価する。

### 2 Phase Field Crystal 法

#### 2.1 秩序変数と支配方程式

PFC 法は、単結晶中の原子配列のような周期状態を表現するために、秩序変数が周期的な値をとることが大きな特徴であり、従来の Phase field 法と大きく異なる点である。本手法にて用いる秩序変数  $\phi$  は、時間平均化された原子の数密度と定義され、保存場である<sup>(1)</sup>。固相領域においては原子の周期構造を表現するため、 $\phi$  は周期的な値をとる。また、 $\phi$  の最大点を原子の位置とする。液相領域においては原子のランダムな配置を時間的に平均化して一定値  $\phi_0$  としている。

ここで、この秩序変数を用いた無次元化された自由エネルギー汎関数<sup>(1)</sup>を以下に示す。

$$F = \int d\vec{x} \left[ \frac{\alpha}{2} \phi^2 + \frac{\phi^4}{4} + \frac{\phi}{2} (1 + \nabla^2)^2 \phi \right] \quad (1)$$

秩序変数を保存場とするため、 $\phi$  の時間発展方程式は次のように表すことができる。

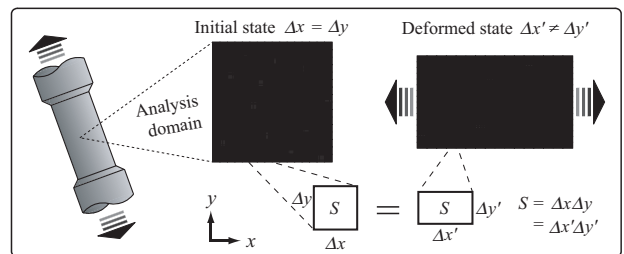


Fig. 1 Numerical scheme of tensile deformation simulation in two dimensions.

$$\frac{d\phi}{dt} = \nabla^2 [\alpha\phi + \phi^3 + (1 + \nabla^2)^2 \phi] \quad (2)$$

ここで、 $\alpha$  は温度に関する駆動力の大きさを決定する係数である。

#### 2.2 体積一定変形の解析手法

変形解析における差分格子の制御法を模式的に図 1 に示す。各時間ステップ  $\Delta t$  毎に差分格子の  $x$  軸方向の長さを  $d (= \epsilon \Delta x \Delta t)$  だけ増加させて  $\Delta x'$  とし、常に差分格子の面積  $S (= \Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y')$  が一定となるように  $y$  軸方向の長さを決定する。ここで、 $\epsilon$  は無次元ひずみ速度、 $\Delta x$ 、 $\Delta y$  は  $x$ 、 $y$  軸方向の初期差分格子幅、 $\Delta x'$ 、 $\Delta y'$  は変形過程における  $x$ 、 $y$  軸方向の差分格子幅である。本手法は、全ての原子に一定のひずみ速度を加えるため、変形状態はアフィン変形に相当する。

### 3 変形シミュレーション

本章では、提案した手法を用いて、異粒径のナノ多結晶体の変形シミュレーションを行い、塑性変形挙動に対する粒径依存性の影響を評価する。

#### 3.1 解析モデル

図 2(a)(b) に示す 2 種類の粒径を有する正六角形定形粒のナノ多結晶モデル Model A と Model B を用いる。図 2(a) の Model A では粒子数を 12、図 2(b) の Model B では、計算負荷を軽減するため粒子数を 6 とする。各々の粒の一辺に、それぞれおよそ 14、42 個の原子が含まれてお

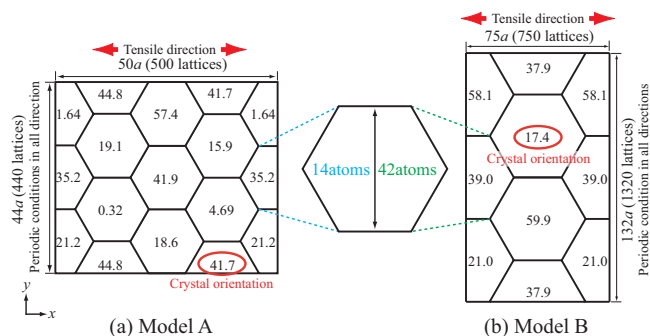


Fig. 2 Desired nanopolycrystalline models with hexagonal grains.

り、粒径比は 1:3 である。また、解析領域サイズはそれぞれ  $44a \times 50a$ ,  $132a \times 75a$  であり、 $440 \times 500$ ,  $1320 \times 750$  の差分格子にて分割している。ここで、 $a$  は最近接原子間距離である。図 2 に示す初期構造を形成させるため、図 2 に示す結晶方位を有する  $\phi$  の分布を核として、正六角形の中心に配置し、凝固シミュレーションにより生成する。高温状態を想定し<sup>(3)</sup>、安定に凝固過程を解析するため、パラメータとして  $(\alpha, \phi_0) = (-0.25, -0.285)$  を用いる。生成後の初期構造は、図 3(a) および図 4(a) に示され、所定の多結晶構造が得られていることが確認できる。また、格子欠陥の位置を容易に把握できるように自由エネルギー表示としている。この初期構造に対して、無次元ひずみ速度  $\dot{\epsilon} = 1.84 \times 10^{-6}$  の下で  $x$  軸方向への引張り変形シミュレーションを行う。これは、実際のひずみ速度では、 $10^1 s^{-1} \sim 10^2 s^{-1}$  に相当する。また、無次元時間ステップを  $\Delta t = 3.0 \times 10^{-3}$  とし、境界条件は周期境界条件を適用する。

### 3.2 解析結果

図 3 は、Model A の変形組織を示している。変形開始から粒回転が生じており、例えば、図 3(b) の円 A で示す転位が移動して粒界で吸収される (図 3(b)-(d))。これより、粒が融合することが確認できる。このとき、粒界上の三重点が消失することから、融合粒周辺の粒界は不安定な状態になり、図 3(d) の楕円 B で示す粒界は、曲率を駆動力として移動し、融合粒が粗大化することが分かる。このようにして、粒回転および粒界移動による粒成長が支配的な変形メカニズムとなり、塑性変形が進行していることが確認できる。

図 4 に、Model B の変形過程を示す。図 3 で示す変形過程と同様、粒界上での転位の移動が観察できるが、前者と異なり、粒回転が生じ難く、変形量が大きくなっても粒の融合は確認できない。高温状態ではあるが、粒径が大きいため、前者に比べて粒回転が起こり難いと考えられる。一方で、粒界の形状が変化し、変形に大きく寄与していることが分かる。例えば、図 4(c) の楕円 C で示すように、粒界が曲率を有する形状に変化していることが確認できる。これは、粒界エネルギーよりも変形による応力の寄与が大きくなるために生じると考えられる。更に変形が進むと、曲率を有する粒界のエネルギーの均衡を維持するため、図 4(d) の楕円 D で示す三重点を含めた粒界が矢印の向きに移動し、粒界 C が非直線から直線へと形状変化することが確認できる (図 4(d)-(f))。対照的に、図 4(f) の楕円 E,

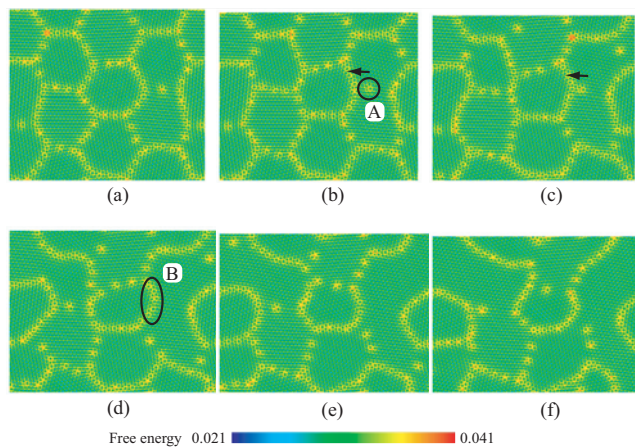


Fig. 3 Deformation process for Model A at  $\epsilon =$  (a) 0.00, (b) 0.02, (c) 0.04, (d) 0.06, (e) 0.08 and (f) 0.10.

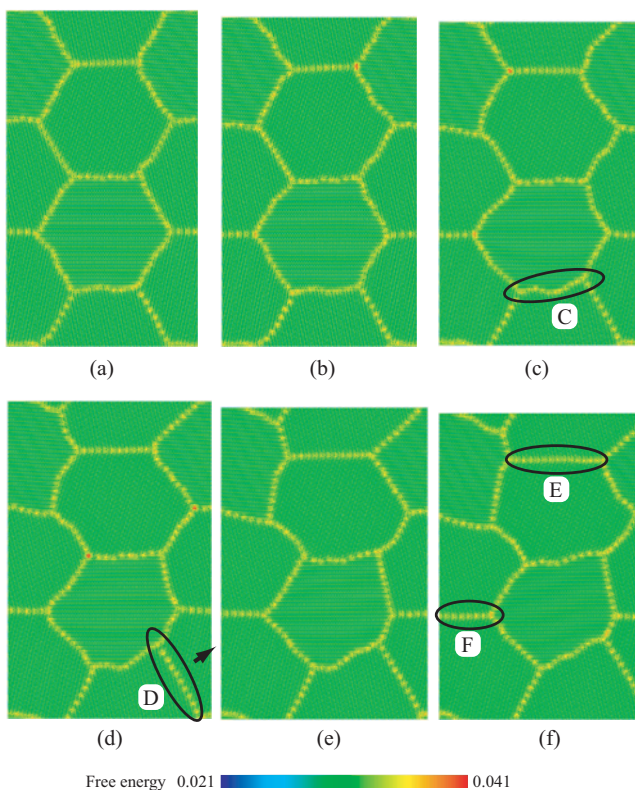


Fig. 4 Deformation process for Model B at  $\epsilon =$  (a) 0.00, (b) 0.02, (c) 0.04, (d) 0.06, (e) 0.08 and (f) 0.10.

F で示す粒界では形状が大きく変化しないことが確認できる。粒界 E, F は対称性の強い結晶方位を有する粒から構成されるため、粒界における構造変化が起き難い状態にあると考えられる。このようにして、粒界構造に大きく依存する粒間変形が支配的な変形メカニズムとなり、塑性変形が進行していることが確認できる。

### 参考文献

- (1) K. R. Elder and M. Grant, Phys. Rev. E **70**, 051605 (2004).
- (2) T. Hirouchi, T. Takaki and Y. Tomita, Proc. of Third AP-COM (CD-ROM), MS31-6-3, 1-8., (2007).
- (3) J. Berry, M. Grant and K. R. Elder, Phys. Rev. E **73**, 031609 (2006).