

Phase-field シミュレーションによる動的再結晶過程の粒径依存性の検討

Study of grain size effects on dynamic recrystallization by phase-field simulations

○久國 陽介・神戸大院

高木 知弘・京工繊大院

富田 佳宏・神戸大院

Y. Hisakuni, Graduate School of Engineering,
Kobe University

T. Takaki, Graduate School of Science and
Technology, Kyoto Institute of Technology

Y. Tomita, Graduate School of Engineering,
Kobe University

Key Words: Phase-Field Method, Dynamic Recrystallization, Microstructural Evolution, Dislocation.

低～中程度の積層欠陥エネルギー材は、熱間加工時に動的再結晶を生じることが知られている。動的再結晶過程は加工硬化による硬化、再結晶による軟化が同時に進行する複雑な現象であり、同現象の高精度予測、詳細なメカニズム解明に関する研究が盛んに行われている。一方で、実験によるその場の内部観察が困難であるため、シミュレーションによる成果が期待されている。我々のグループでは組織発展を精度良く再現することのできる Phase-field 法を用い、動的再結晶の数値モデルを構築した。本研究では、構築したモデルを用いた数値解析により、熱間加工過程における動的再結晶組織発展および力学特性に対する初期粒径の影響を体系的に評価する。

1. 緒言

熱間加工過程では、変形と同時に回復や再結晶が生じる動的復旧過程が進行する。このとき、金属固有の積層欠陥エネルギー(SFE)の大きさによって、動的復旧過程として動的回復か動的再結晶のいずれかが支配的になることが知られている。つまり、低～中 SFE 材においては転位の上昇運動が起こりにくく、回復が困難になる。その結果、蓄積された転位が駆動力となって再結晶が生じる。動的再結晶は変形に伴う転位の蓄積による硬化と再結晶による軟化が同時に進行する複雑な現象であり、その高精度な予測・詳細なメカニズム解明のために実験^[1]および数値的な面^[2]からの研究が進められている。

本研究では、Multi-Phase-Field 法による動的再結晶モデル^[3]を用いて、動的再結晶過程の特徴的な力学特性と微視組織の発展を評価することを目的とする。特に動的再結晶に影響をおよぼす初期粒径依存性について体系的な評価を行う。

2. 数値モデル

文献[3]で構築した動的再結晶 Multi-Phase-Field(DRX-MPF)モデルに基づき、数値モデルを説明する。図 1 に示すように各粒を phase field ϕ_n を用いて表す。ここで、 $\phi_n = 1$ は粒 n の粒内、 $1 > \phi_n > 0$ は粒界を示す。また、粒内の転位密度は一定としている。 ϕ の時間発展方程式は次式のように与えられる。

$$\dot{\phi} = -\sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (1)$$

ここで、 ΔE_{ij} 、 M_{ij}^{ϕ} 、 W_{ij} 、 a_{ij} はそれぞれ駆動力、モビリティ、エネルギー障壁の高さ、そして勾配係数であり次のように物性値と関連付けられる。

$$\Delta E_{ij} = \tau(\rho_j - \rho_i), \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij}, \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, \quad a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}} \quad (2)$$

ここで、 τ 、 δ 、 M_{ij} 、 γ_{ij} はそれぞれ転位線エネルギー、界面幅、粒界モビリティ、粒界エネルギーである。界面幅 δ は差分格子距離 dx の 7 倍 ($\delta = 7dx$) としている。粒界エネルギーと粒界モビリティは、低角粒界 ($\theta < 15^\circ$) においては次式のように方位差に依存させる。

$$\gamma = \gamma_m \frac{\theta}{\theta_m} \left(1 - \ln \left(\frac{\theta}{\theta_m} \right) \right), \quad M = M_m \left(1 - \exp \left(-5 \left(\frac{\theta}{\theta_m} \right)^4 \right) \right) \quad (3)$$

ここで θ は結晶粒間の方位差、 γ_m 、 M_m は $\theta = \theta_m = 15^\circ$ における

粒界エネルギー、粒界モビリティである。

つづいて、核生成および蓄積転位密度に関しては文献[2]を参考に以下のように定める。すなわち、核生成条件としてバルジ機構を考慮した式(4)で与えられる臨界転位密度を用い、高角粒界上の ρ_c 以上の転位密度を有する格子点上に、式(5)で与えられる核生成速度に基づきランダムに核を配置する。このとき、再結晶核と母相の方位差が $0 < \theta < 10^\circ$ となるように再結晶核の方位を与えている。

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma\dot{\epsilon}}{3\tilde{b}LM\tau^2} \right)^{1/3}, \quad L = K/\alpha\sqrt{\rho} \quad (4)$$

$$\dot{n} = c\dot{\epsilon}^m \exp \left(-\frac{Q_{act}}{RT} \right) \quad (5)$$

式(4)における $\dot{\epsilon}$ 、 \tilde{b} 、 L 、 α 、 K はそれぞれ、ひずみ速度、バーガスベクトルの大きさ、転位の平均自由行程、転位線エネルギー、0.5 オーダーの定数、10 程度の定数であり、式(5)における c 、 Q_{act} はそれぞれ定数、活性化エネルギーである。

また、蓄積転位密度の発展式は Kocks と Mecking が提唱した次式で表される KM モデルを用いる。

$$\frac{d\rho}{d\epsilon} = k_1\sqrt{\rho} + \frac{1}{bd} - k_2\rho \quad (6)$$

k_1, k_2 は実験値より定められる係数、 d は平均粒径である。

解析手順を図 2 に示す。まず各格子点に初期転位密度 ρ_0 を与えた後、KM モデルに従い転位密度を進展させ、核生成条件を満たす格子点に核を設置する。その後 Phase-Field 法によって粒成長させる。このような転位の蓄積、核生成、粒成長を繰り返すことで解析を行う。

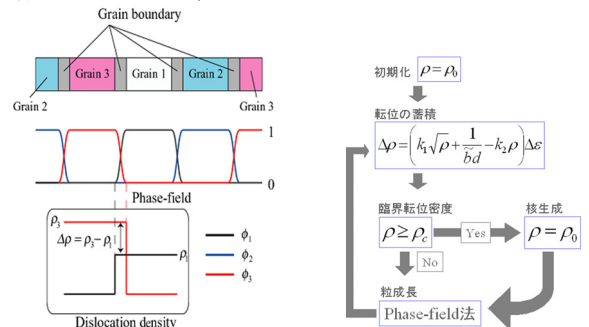
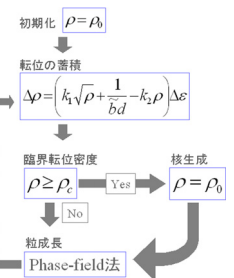


Fig.1 Phase field and dislocation density profiles, Fig.2 Numerical procedure.



3. 解析モデル

初期粒径依存性を検討するため、初期粒径 $D_0 = 200, 100, 50, 33 \mu\text{m}$ を有する初期構造を用いる。 $T=775 \text{ K}$, $\dot{\epsilon}=2 \times 10^{-3} \text{ 1/s}$ の下で $\epsilon=0.5$ まで解析を行う。各物性値は OFHC 銅のものを用いている(表 1)。解析領域はいずれも $400 \times 315 \mu\text{m}$ (800×630 lattices)、境界は周期境界条件としている。

Table.1 Materials and computational parameters.

Parameters	Values
τ	5.39 [J/m]
ρ_0	1.0×10^9 [1/m ²]
γ	0.600 [J/m ²]
k_1, k_2	520×10^6 [1/m], 31.1
\tilde{b}	2.56×10^{-10} [m]
Q_{act}	275 [kJ/mol]

4. 解析結果・考察

解析の結果得られた応力-ひずみ関係を図 3 に示す。なお、応力は次式を用いて解析領域全体の平均転位密度より求めている。

$$\sigma = \alpha \mu \tilde{b} \sqrt{\rho} \quad (7)$$

いずれの初期粒径においても、臨界転位密度 $\rho_c = 1.3 \times 10^{14} \text{ 1/m}^2$ となり、対応する応力 σ_c は 60.5 MPa であった。その後、加工硬化により応力は増加し、再結晶による軟化とバランスするピーク値に達する。ここで、 $D_0 = 33 \mu\text{m}$ においては $\epsilon = 0.085$ あたりで応力のピーク(65.2 MPa)を迎えるのに対し、 $D_0 = 200 \mu\text{m}$ では $\epsilon = 0.160$ においてピーク(75.4 MPa)を迎えた。これら初期粒径による差は再結晶の進行の違いによるものであり、初期粒径が小さいほど応力のピーク値が低くなる事が確認されている。つづいて、再結晶による軟化が加工硬化よりも支配的になると応力は減少し始める。 $D_0 = 200, 100, 50$ においては、応力が滑らかな曲線を描いて減少し単一極大値をもった応力-ひずみ曲線が得られた。一方、 $D_0 = 33$ においてはある程度の応力の減少後、再び応力が増加し、以降振動する形の曲線が得られる。いずれのモデルにおいても、変形が進むと応力は定常値($\sigma_s = 54 \text{ MPa}$)をとり、またこの定常応力は初期粒径に依存しない結果が得られた。

平均粒径の変化を図 4 に示す。再結晶開始後平均粒径は減少し続け、応力と同様、変形がある程度進むと定常値($D_s = 13 \mu\text{m}$)に達している。また、定常応力と同様に初期粒径に依存せず一定の値をとる結果が得られた。

次に、各初期粒径における再結晶分率の変化を図 5 に示す。初期粒径が小さいほど再結晶の進行が速いことがわかる。より詳細に検討するため、 $D_0 = 200, 33$ における再結晶サイクル毎の再結晶分率の変化を図 6 に、微視組織の発展を図 7 に示す。グラフと組織図の色は対応しており、初期結晶粒を青色、初期結晶粒より生成した 1 サイクル目の再結晶粒を水色、2 サイクル目の再結晶粒を緑色、3 サイクル目を黄色、4 サイクル目以降を赤色で示した。 $D_0 = 200$ においては、初期粒が再結晶粒に比べて非常に大きいため、ネックレス状に再結晶が進行していく様子が確認できる。一方 $D_0 = 33$ では核生成サイトと成る粒界が多いため、再結晶が非常に早く進行している。これら再結晶の進行の差が応力-ひずみ曲線にも大きく影響していることが知られている。大きい初期粒径では再結晶粒が初期結晶粒を埋め尽くす前に、新たな再結晶が進行する。一方小さい初期粒径では再結晶がほぼ進行し終わった後に、新たな再結晶が開始される。これらの傾向が図 6 及び 7 より確認することが出来る。

以上より、初期粒径に依存する微視組織発展及びそれに基づく応力-ひずみ関係を精度良く再現することを確認した。

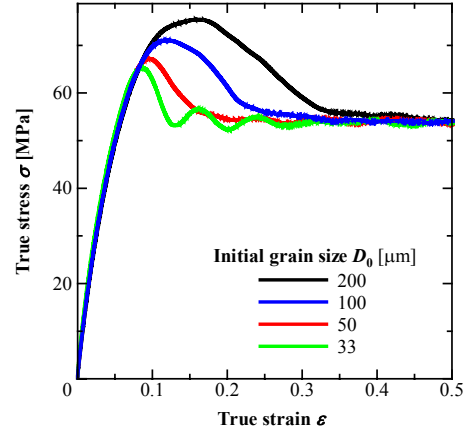


Fig.3 Stress-strain curves.

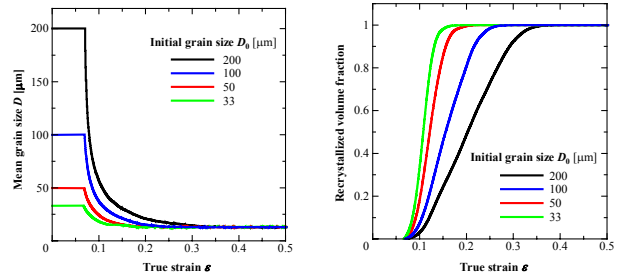


Fig.4 Variations in mean grain size, Fig.5 Recrystallized volume fractions.

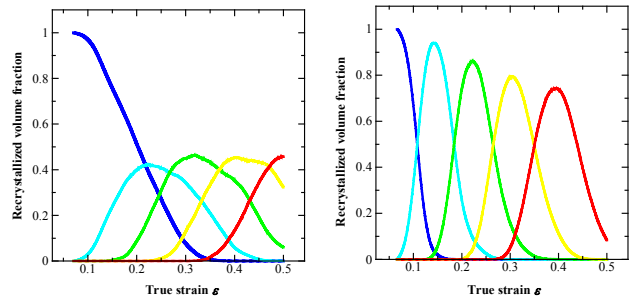


Fig.6 Recrystallized volume fractions for each DRX cycle for (a) $D_0 = 200$ and (b) 33.

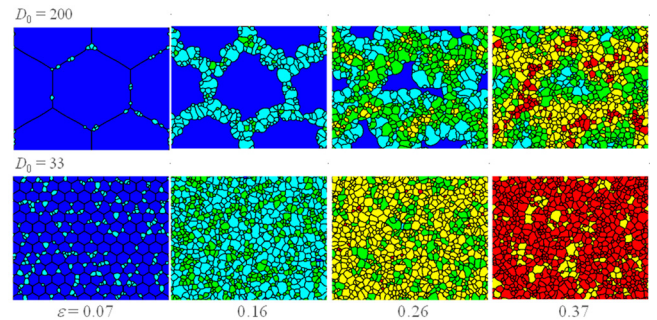


Fig.7 Microstructural evolutions for (a) $D_0 = 200$ and (b) 33.

参考文献

[1] T.Sakai and J. J. Jonas, Acta Metall., 32 (1984), 189-209
 [2] R.Ding and Z. X. Guo, Acta mater. 49 (2001), 3163-3175
 [3] T.Takaki, T.Hirouchi, Y.Hisakuni, A.Yamanaka, Y.Tomita, Materials Transactions (2008), in press