

Multi-Phase-Field シミュレーションによる動的再結晶の特性評価

Investigations of dynamic recrystallization process by multi-phase-field simulations

○ 学 久國 陽介 (神戸大院) 正 高木 知弘 (京都工繊大)
 正 富田 佳宏 (神戸大院)

Yousuke HISAKUNI, Graduate School of Engineering, Kobe University, 1-1, Rokko-dai, Nada, Kobe, Hyogo

Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Science and Technology, Kyoto Institute of Technology, Matsuzaki, Sakyo, Kyoto

Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University, 1-1, Rokko-dai, Nada, Kobe, Hyogo

Key Words: Phase Field Method, Simulation, Dynamic Recrystallization, Microstructure Evolution, Dislocation

1. 緒言

熱間加工過程では、高温のために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。中～低 SFE 材においては、転位の拡張傾向が強まり上昇運動が起こりにくい。そのため動的回復が起こりにくく、結果的に、蓄積された転位が駆動力となって動的再結晶が生じる。動的再結晶は変形に伴う転位増殖による硬化再結晶粒成長による軟化が同時に起こ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⁾および数値解析²⁾による研究が進められている。特に、実験によるその場の内部観察が困難であるため、数値解析による貢献が期待されている。

本研究は、Multi-Phase-Field 法による動的再結晶モデルを用いて、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。講演では初期粒径依存性、およびひずみ速度依存性に関する検討を発表する。

2. 数値モデル

文献[3]で構築した動的再結晶 Multi-Phase-field (DRX-MPF) モデルを概説する。図 1 に示すように各粒を phase field ϕ_i を用いて表す。ここで、 $\phi_i = 1$ は粒 i の粒内、 $1 > \phi_i > 0$ 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。

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

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。

$$\Delta E_{ij} = \tau(\rho_j - \rho_i) \quad (2)$$

$$M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij} \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta} \quad a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}$$

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 Δx の 7 倍 ($\delta = 7\Delta x$) 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。

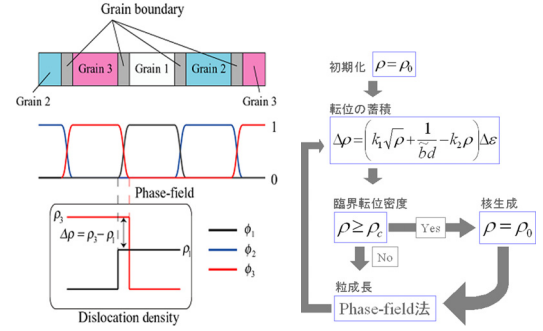


Fig.1 Phase field and dislocation density profiles, Fig2 Numerical procedure.

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]

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。

3. 初期結晶粒径依存性

初期結晶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), 境界を周期境界条件としている。

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。

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

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が、各ピーク値が初期粒径によって異なることが確認できる。これらは初期粒径によって核生成サイトとなる粒界領域が変化するためである。

$D_0 = 200, 33\mu\text{m}$ における再結晶サイクルごとの再結晶分率の変化、および微視組織の発展を図 5, 6 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、1 サイクル目の再結晶粒を水色、2, 3 サイクル目の再結晶粒を緑、黄、4 サイクル目以降を赤で示している。初期粒径が小さいほど核生成サイトとなる粒界領域が多く再結晶の進行が速い。これら再結晶進行の差が応力-ひずみ関係にも大きく影響していることが知られている。変形が進行すると応力は定常値 ($\sigma_s = 54 \text{ MPa}$) をとるが、こちらは初期粒径に依存しない結果が得られた。

図 4 に平均粒径の変化を示す。再結晶開始直後より平均粒径は減少し、変形が進行すると応力と同様に定常値 ($D_s = 13\mu\text{m}$) に達し、定常粒径も初期粒径に依存しない傾向が確認できた。

4. ひずみ速度依存性

動的再結晶過程は温度、ひずみ速度に大きく影響を受けることが知られている。ここではひずみ速度による影響を検討するため、 $D_0 = 200\mu\text{m}$ の下、ひずみ速度を $\dot{\epsilon} = 0.1, 0.5, 2.0, 4.0$ ($\times 10^{-3} \text{ 1/s}$) と変化させて解析を行った。解析領域や各物性値および境界条件は上の解析と同様のものを用いている。

得られた応力-ひずみ関係を図 7 に、平均粒径の変化を図 8 に示す。各ひずみ速度 $0.1, 0.5, 2.0, 4.0$ ($\times 10^{-3} \text{ 1/s}$) に対応した臨界転位密度 ρ_c は $0.38, 0.72, 1.25, 1.66$ ($\times 10^{14} \text{ 1/m}^2$) であり、ひずみ速度が小さいほど低転位密度で再結晶が開始する。このため、応力のピーク値も低ひずみ速度であるほど小さくなる結果となった。定常応力および粒径に注目すると、ひずみ速度が小さいほど、定常応力は小さく、逆に定常粒径は大きくなっており、実験での観察結果と同様の傾向を確認できる。ただし、 $\dot{\epsilon} = 4.0 \times 10^{-3}$ においては $\epsilon = 0.5$ においても定常状態に達していないものの、その他のひずみ速度での結果と同様の傾向が得られると予測できる。

ひずみ $\epsilon = 0.5$ における、各ひずみ速度におけるの微視組織を図 9 に示す。結晶粒を青、粒界を緑で示している。低ひずみ速度では再結晶粒が比較的大きくなっており、逆にひずみ速度が大きくなるほど再結晶粒は小さくなる。なお、 $\dot{\epsilon} = 4.0 \times 10^{-3}$ においては再結晶が完了していないことが分かる。これらの再結晶進行の違いは、ひずみ速度の差が式(5)からも分かるように核生成速度に影響を与えること、また臨界転位密度の減少や転位の蓄積が小さくなることで複合し影響を与えたと考えられる。

以上より、初期粒径、およびひずみ速度に依存する微視組織の発展と、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。

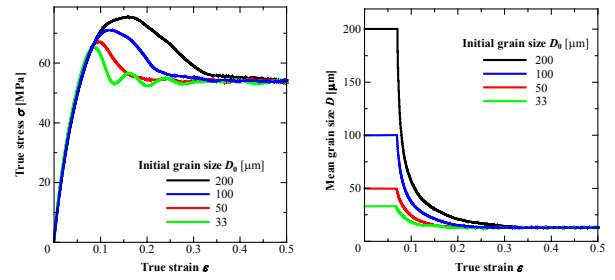


Fig.3 Stress-strain curves for different initial grain sizes, Fig.4 Variations in mean grain size for different initial grain sizes.

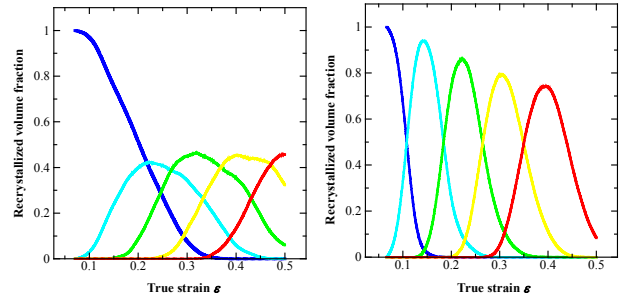


Fig.5 Recrystallized volume fractions for each DRX cycle for (a) $D_0 = 200$ and (b) $33 \mu\text{m}$.

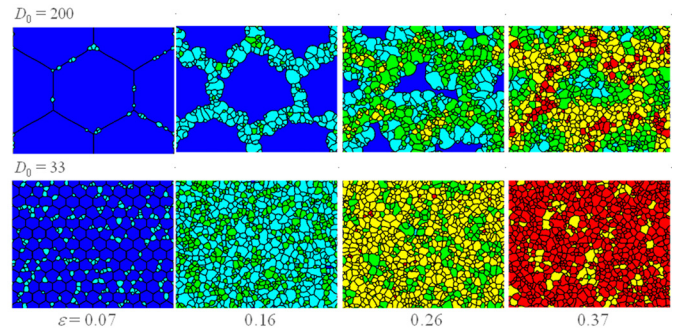


Fig.6 Microstructural evolutions for (a) $D_0 = 200$ and (b) $33 \mu\text{m}$.

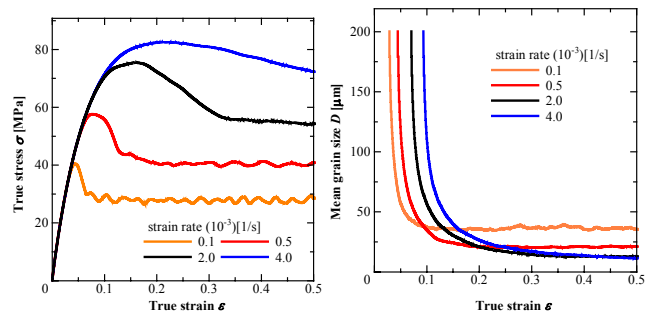


Fig.7 Stress-strain curves for different strain rates, Fig.8 Variations in mean grain size for different strain rates.

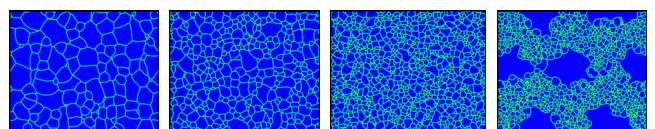


Fig.9 Microstructures at $\epsilon = 0.5$ for strain rates $0.1, 0.5, 2.0,$ and 4.0 ($\times 10^{-3}$) from left.

5. 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 Trans actions (2008), in press