

Phase Field 法による多結晶金属の結晶粒成長シミュレーション

Phase Field Simulation of Grain Growth of Polycrystalline Metals

○ 学 山本裕介 (神戸大・院) 正 高木知弘 (神戸大・海事科学)
 正 富田佳宏 (神戸大・工)

Yusuke YAMAMOTO, Kobe Univ., Grad. Sch. Sci. & Tech., Nada, Kobe, 657-8501
 Tomohiro TAKAKI, Kobe Univ., Fac. Maritime Sci., Higashinada, Kobe, 658-0022
 Yoshihiro TOMITA, Kobe Univ., Dept. Mech. Eng., Fac. Eng., Nada, Kobe, 657-8501

Key Words: Phase Field Method, Grain Growth, Grain Boundary, Free Energy, Crystal Orientation, Finite Element Method

1 緒言

現在一般的に使用されている金属のほとんどは、多結晶組織を有し、個々の結晶相は結晶粒界で結合している。金属の回復、再結晶過程は基本的に結晶粒界の移動、および結晶粒の回転の2つのプロセスによって進行し、時間の経過とともに平均的な結晶粒の大きさを増大させる⁽¹⁾。このような結晶成長過程は自由境界問題として扱われ、結晶粒界の位置、形状、移動速度を決定する必要があるためその解析には困難が伴う。

本研究では、結晶粒界を直接扱う必要のない Phase Field 法^{(2)~(3)}を用いて結晶粒界の移動、結晶粒の回転を相領域を表す秩序パラメーターによって同時に記述し、塑性変形において結晶内部に蓄積されたひずみエネルギーが結晶粒成長過程に及ぼす影響を明らかにすることを目的とする。

2 支配方程式

結晶粒界は、固液界面と同様に付加的なエネルギーを有しているために原子の移動が可能な温度に保持されると、この余分なエネルギーを減少させる方向、すなわち結晶粒界の面積を減少させる方向へ駆動力が発生し結晶粒界が移動する。

本研究では、相領域を区別する秩序パラメーターとして θ と η を用いる。 η はバルク相と結晶粒界を区別するための秩序パラメーターで $\eta = 1$ で表される領域はバルク相であることを、 $\eta < 1$ で表される領域は結晶粒界であることを意味し、 θ は各結晶粒の結晶方位を表す秩序パラメーターである。また結晶粒界は微小な有限厚さを有し、Fig.1 に示すように θ および η を結晶粒界を隔てて連続的に分布させる⁽⁴⁾。

これらの秩序パラメーターを用いて以下に示すような自由エネルギー汎関数 E_1 を定義する⁽⁵⁾。

$$E_1 = \int_V \left(f(\eta) + \frac{\nu^2}{2} (\nabla\eta)^2 + s\mu(\eta) |\nabla\theta| + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\theta|^2 \right) dV \quad (1)$$

ν, s および ε は正の定数である。

ここで式 (1) の右辺第一項、二項は結晶粒界の存在に起因して発生する付加的な自由エネルギーを意味している。第一項については結晶相のみが安定していることを表す最も簡単な関数として式 (2) のように定義

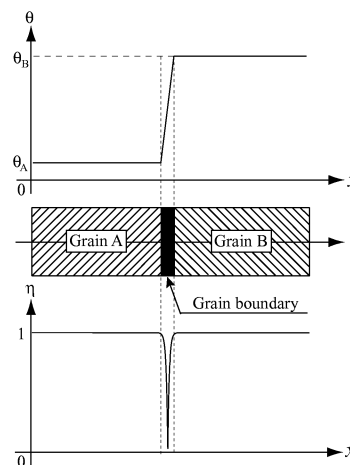


Fig. 1 Description of One-dimensional Grain Boundary by θ and η

する。

$$f(\eta) = \frac{1}{2}(1 - \eta)^2 \quad (2)$$

本研究では一般性を失わないために、 $f(\eta)$ の極小値として $f(1) = 0$ を用いる⁽⁴⁾。

式 (1) の右辺第三項は隣接する結晶相の方位の不整合に起因して発生するエネルギーを表し s はそのエネルギーの影響の大きさを決定する係数である。また $\mu(\eta)$ については、結晶粒界においてステップ関数状に分布する θ を微分可能とするために乗じる係数で、式 (3) に示すような単調増加関数を使用する⁽⁴⁾。

$$\mu(\eta) = \eta^2 \quad (3)$$

式 (1) の右辺第四項は θ をより滑らかに表現し、結晶粒界の曲率の影響を与えるために $|\nabla\theta|$ の高次の項を付加したものである⁽⁵⁾。

ここで変形によって蓄積されるひずみエネルギー、および結晶粒の回転によって発生する付加的なエネルギー E_2 が結晶方位の変化の2乗に比例すると仮定し、式 (4) のような自由エネルギー汎関数を定義する。

$$E_2 = \int_V \frac{a}{2} (\theta - \theta_{ini})^2 dV \quad (4)$$

以下では E_2 をひずみエネルギーと称する。また式 (4) において、 θ_{ini} は塑性変形を与える前の結晶方位を表し、 a は正の定数とする。本研究では、金属の加工から結晶成長までの一連の過程を対象とするため、式 (1) で定義した自由エネルギー汎関数 E_1 にひずみエネル

ギー E_2 を加えて全自由エネルギー \tilde{E} を次のように表す.

$$\tilde{E} = E_1 + E_2 \quad (5)$$

系の状態は、式 (5) に示す自由エネルギー汎関数の減少率が最大になる経路をたどって変化するという仮定に基づくと、秩序パラメーター η , および θ に関する発展方程式は下記ようになる.

$$\begin{aligned} \tau_\eta \frac{\partial \eta}{\partial t} &= -\frac{\delta \tilde{E}}{\delta \eta} \\ &= \nu^2 \nabla^2 \eta + 1 - \eta - s\eta |\nabla \theta| \quad (6) \\ \tau_\theta \eta^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} &= -\frac{\delta \tilde{E}}{\delta \theta} \\ &= s \nabla \cdot \left[\eta^2 \frac{\nabla \theta}{|\nabla \theta|} \right] + \varepsilon^2 \nabla^2 \theta \\ &\quad - a(\theta - \theta_{ini}) \quad (7) \end{aligned}$$

3 解析モデル

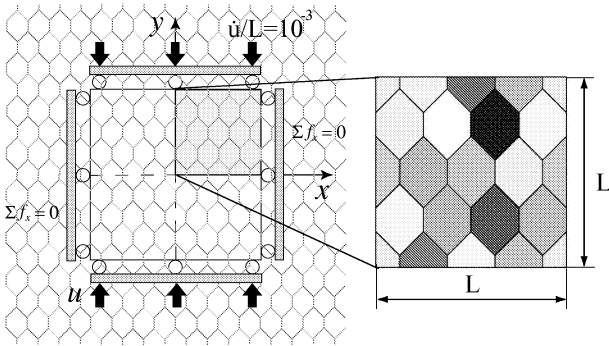


Fig. 2 Computational Model for Plastic Deformation⁽⁶⁾

Fig.2 に、平面ひずみ状態で圧縮変形を受ける多結晶モデルを示す. 結晶方位は各結晶毎にランダムに与え、結晶方位が異なる面に粒界が存在するとしている. このモデルは $L \times L$ ($L = 0.2627\text{mm}$) の領域を 32×32 の Crossed-Triangles 要素で分割し、また周囲境界に対しては対称境界条件を与えて有限要素シミュレーションを行った. ここでひずみ速度 \dot{u}/L が 1.0×10^{-3} の圧縮変形を与え、ひずみ u/L がそれぞれ (a)0.10, (b)0.20, (c)0.30, (d)0.40 になった時点の結晶粒界の位置と結晶方位の分布を Fig.3 に示す. この際、結晶方位についてはひとつの結晶粒内で一様であるとし、各結晶粒に含まれる三角形要素の結晶方位データの平均値を使用する.

これらの結晶塑性のシミュレーションで得られた結晶粒界の位置、結晶方位を η , および θ に変換し、Phase Field シミュレーションを行う. Phase Field シミュレーションでは、周囲境界条件として η , θ に対し、ノイマン条件 $\partial \eta / \partial n = 0$, $\partial \theta / \partial n = 0$ を与えた. また θ の初期条件として上記の塑性変形後に求められた結晶方位を使用した. なお (a)~(d) においてそれぞれ解析領域のサイズが異なるため Phase Field シミュレーションに関しては Crossed-Triangles 要素のサイズを全ての場合において統一して分割を行った.

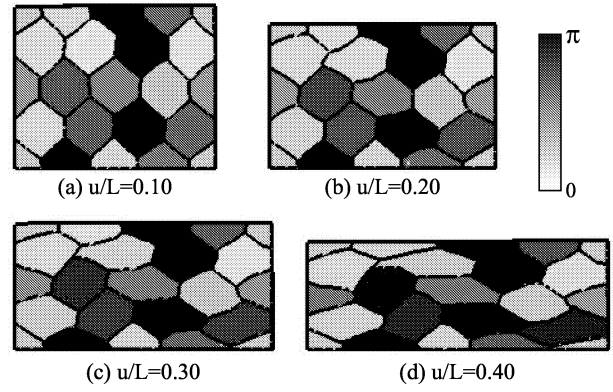


Fig. 3 Distribution of Grain Boundary and Crystal Orientation at Different Deformation Stages

Phase Field シミュレーションの際には、空間に対しては有限要素法を、時間に対しては差分法 (前進差分) を適用し、連立 1 次方程式の解法としては、共役勾配法 (7) を用いた.

4 解析結果

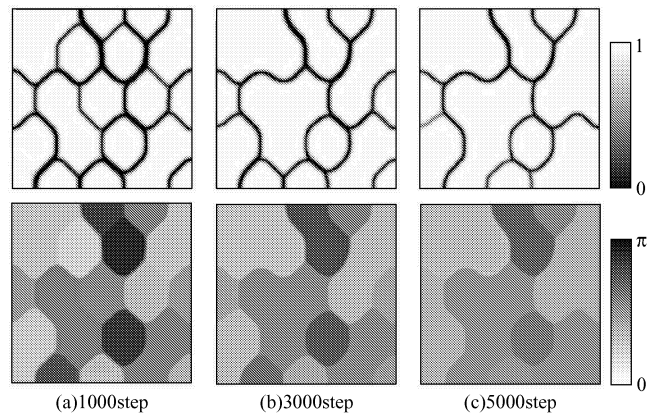


Fig. 4 Distribution of Grain Boundary and Crystal Orientation without Plastic Strain

Fig.4 に塑性変形を全く与えない ($u/L=0.0$) 場合の Phase Field シミュレーションの結果を示す. 時間の経過とともに、結晶粒界の移動、および結晶粒の回転により隣接する結晶粒の方位が一致し、結晶粒界が消滅していることがわかる. 上記の計算を Fig.3 に示すような各変形状態に対して行い、蓄積されたひずみエネルギーが結晶成長に及ぼす影響を検討する. これらの結果の詳細については講演当日に発表する.

5 参考文献

- 1) 小原嗣朗, 回復と再結晶, (1968), 丸善
- 2) Caginalp, G., *Arch.Rat.Mech.Anal.*, **92**, (1986), 205
- 3) Kobayashi, R., *Physica D*, **63**, (1993) 410
- 4) Kobayashi, R., Warren, J. A., and Carter W. C., *Physica. D*, **140**, (2000), 141
- 5) Kobayashi, R., Warren, J. A., and Carter W. C., *GAKUTO International Series "Mathematical Science and Applications"*, **14**, (2000), 283
- 6) 比嘉吉一, 澤田幸秀, 富田佳宏, 機論, **69A**, (2003), 523
- 7) 戸川隼人, 共役勾配法, (1977), 新曜社