

# 結晶塑性理論を用いた静的再結晶の Phase-field モデリング

## Phase-field modeling of static recrystallization using crystal plasticity modeling

○ 学 田中克昌 (神戸大・院) 正 高木知弘 (神戸大・海科)  
正 富田佳宏 (神戸大・工)

Katsumasa TANAKA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501  
Tomohiro TAKAKI, Faculty of Maritime Sciences, Kobe University, Higashinada, Kobe, 658-002  
Yoshihiro TOMITA, Department of Mechanical Engineering, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501

**Key Words** : Phase-Field Method, Static Recrystallization, Crystal Plasticity Theory

### 1 緒言

再結晶の成長挙動は塑性変形時の変形組織の影響を強く受ける事が知られている<sup>(1)</sup>。そのため、再結晶組織を精度良く予測・制御するためには、塑性加工時における材料の変形特性、および再結晶粒成長過程を一貫して評価する必要がある。また、焼鈍時に転位組織の変化により、蓄積エネルギーの減少を引き起こす「回復」は、再結晶カイネティクスに大きな影響を与える現象である<sup>(2)</sup>。そこで本研究では、結晶塑性理論を用いて多結晶体の変形特性を評価し、そこで得られた情報と Phase-field 法を用いて静的再結晶過程をシミュレートする手法を構築する。また、回復の影響を考慮し、蓄積エネルギーの減少が再結晶カイネティクスに与える影響について考察する。

### 2 シミュレーションモデル

まずはじめに、ひずみ勾配結晶塑性理論<sup>(3)</sup>を用いて多結晶金属の変形特性を評価する。本モデルでは、すべり系 (a) における蓄積転位密度  $\rho_a^{(a)}$  を統計的に蓄積する転位 (SS 転位) 密度  $\rho_S^{(a)}$  と幾何学的に必要な転位 (GN 転位) 密度  $\rho_G^{(a)}$  の和  $\rho_a^{(a)} = \rho_S^{(a)} + \rho_G^{(a)}$  として表している。これにより算出された転位密度  $\rho_a^{(a)}$ 、結晶方位  $\theta$ 、蓄積エネルギー  $E_{store}$  を Phase-field シミュレーション過程に導入する。なお、蓄積エネルギーは  $E_{store} = 0.5\rho_a\mu\tilde{b}^2$  を用いて算出した。ここで、 $\mu$  は剛性率、 $\tilde{b}$  はバーガースベクトルの大きさである。

Phase-field モデル<sup>(3)</sup>では、次式の自由エネルギー汎関数を用いる。

$$F = \int \left[ f_d(\phi) + f_s(\phi, \rho) + \frac{\alpha^2}{2} |\nabla\phi|^2 + g(\phi)s|\nabla\theta| \right] dV \quad (1)$$

ここでは、二つの秩序変数、phase field  $\phi$  と結晶方位  $\theta$  を導入している。 $\phi$  は変形母相中で 0、再結晶粒で 1 の値をとる変数。 $\theta$  は再結晶粒の結晶方位を表している。ここで右辺被積分第 1 項は  $f_d(\phi) = Wq(\phi)$  で表されるダブルウェルポテンシャルである。 $W$  はエネルギー障壁、 $q(\phi)$  はダブルウェル関数で  $q(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$  を用いている。被積分第 2 項は  $f_s(\phi, \rho) = (1-p(\phi))E_{store}$  で、変形母相内の蓄積エネルギー密度を表している。 $p(\phi)$  はエネルギー密度関数で  $p(\phi) = \phi^3(10-15\phi+6\phi^2)$  を用いている。ここで、再結晶内のエネルギーは変形母相内のエネルギーに比べて非常に小さい<sup>(1)</sup> ので無視している。被積分第 3 項は界面における  $\phi$  の勾配が

存在することによる付加的なエネルギーの項であり、 $\alpha$  は勾配係数である。被積分第 4 項は、再結晶粒界に結晶方位差が存在することによるエネルギーである。 $s$  はその大きさを決定する係数、 $g(\phi)$  は変形母相内でこの項の影響をなくすため、 $g(0) = 0$  となる単調増加関数  $g(\phi) = \phi^2$  を用いている。

系の状態は式 (1) の全自由エネルギーを最も早く減らす方向に進むと仮定すると、 $\phi$  と  $\theta$  の時間発展方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M_\phi \left[ \alpha^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} - \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} s |\nabla\theta| \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = M_\theta \frac{1}{\phi^2} \nabla \cdot \left[ g(\phi) s \frac{\nabla\theta}{|\nabla\theta|} \right] \quad (3)$$

$M_\phi$  と  $M_\theta$  は易動度である。本モデルの特徴として結晶方位の回転を表現できる点があるが、ここでは  $M_\theta = (1-p(\phi))M_\theta$  と設定し、再結晶粒内 ( $\phi = 1$ ) で  $M_\theta = 0$  となるようにして再結晶粒内の方位の回転を抑制している。

### 3 解析モデル・結果

ランダムに結晶方位を与えた 23 結晶粒を有する一辺が 409.6[ $\mu\text{m}$ ] の正方形領域を解析対象とする。この正方形領域を  $64 \times 64$  の Crossed-Triangles 要素で分割する。このとき平均粒径は 115.5[ $\mu\text{m}$ ] である。この多結晶体を 2 すべり系平面ひずみ状態として、ひずみ速度 0.01[ $\text{s}^{-1}$ ] において 50% まで圧縮変形させる。図 1 に (a) 変形前の結晶方位、50% 圧縮時の (b) 結晶方位と (c) 蓄積エネルギーの分布を示す。結晶方位は粒界を境に、粒によって大きく異なるが、粒内にも方位差を生じている領域もある。蓄積エネルギーは、概して粒界近傍で高くなり、粒内で低くなっている。

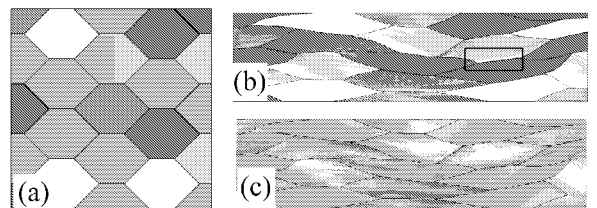


Fig. 1 Crystallographic orientation (a) before deformation and (b) at 50% compression, and (c) stored energy.

これは粒界での転位密度が高いためである。

Phase-field 解析は、図 1(b) 中に黒線で囲んだ粒界近傍の長方形領域 ( $134.4[\mu\text{m}] \times 51.2[\mu\text{m}]$ ) を解析対象として用いる。ここで、格子間隔は  $0.4[\mu\text{m}]$ 、時間増分は  $0.01[\text{s}]$  としている。核の生成条件は、(1) 結晶方位差  $15^\circ$  以上<sup>(1)</sup> (2) 蓄積エネルギーが最大値の 60% 以上 (3) 核間距離  $4\mu\text{m}=10\text{dx}$  以上の全条件を満足する節点とする。また、核生成方法には二種類のモデルを適用する。一つは、すべての核を解析開始時から生成させる site saturated nucleation(SSN) モデル、もう一つは、時間とともに核を生成させる continuous nucleation rate(CNR) モデルである。CNR モデルでは、実際の核生成速度は再結晶領域の増大とともに遅くなるという実験結果を表現するために、核生成速度を  $\dot{N}(1-X)$  としている。ここで  $\dot{N}[\text{s}^{-1}]$  は一定核生成速度、 $X$  は再結晶面積分率である。図 2 に (a)SSN モデルと (b)CNR モデル ( $\dot{N} = 1/25$ ) の核の成長と再結晶後の組織を示す。図中の黒線は元の結晶粒界を表している。SSN モデルでは、粒界と粒内に形成された結晶方位差が大きい領域で核が多く生成していることがわかる。これは、粒界において核生成が活発であることを表現できている。また核の成長とともに、粒内に生成した核と粒界に生成した核が衝突し、新しい粒界を形成していることがわかる。CNR モデルでは核が時間とともに生成している様子が見られる。しかし、SSN モデルで見られたような核の衝突が減少している。これは、粒界にできた核が成長し、粒内に核が生成する前に再結晶が進行したためである。また、再結晶後の組織は SSN モデルに比べて CNR モデルの方が粒の大きさが大きくなっている。これは先ほどと同じように CNR モデルでは核の成長とともに核生成サイトが減少するために、粒の衝突回数が減少したためである。

次に、回復をモデルに適用する。ここでは実験データに基づいた式 (4) を用いて、蓄積エネルギーを時間と共に減少させる<sup>(5)</sup>。

$$E_{store} = \left[ (E_{store})_{t=0}^{1/2} - C \frac{kT}{\sqrt{\mu}} \ln \left( 1 + \frac{t}{t_0} \right) \right]^2 \quad (4)$$

ここで、 $C$  は定数、 $k$  はボルツマン係数、 $T$  は焼鈍温度、 $\mu$  は剛性率、 $t_0$  は再結晶が始まる時間である。図 3 に SSN モデル (site1)、SSN モデルにおいて回復を考慮 (site2)、CNR モデルにおいて  $\dot{N} = 25$  (constant1)、 $\dot{N} = 50$  (constant2)、CNR モデル ( $\dot{N} = 25$ ) において回復を考慮 (constant3) で解析を行った場合の (a) 再結晶面積分率、(b)JMAK プロットを示す。JMAK プロットは横軸に  $\ln(t)$ 、縦軸に  $\ln[-\ln(1-X)]$  をプロットしたもので、この直線部の傾きを Avrami 係数と呼び再結晶カイネティクスの評価によく用いられている。SSN モデルと CNR モデルでは、CNR モデルで再結晶速度が遅くなり、Avrami 係数が大きくなっているのがわかる。これは核生成速度の影響のためで、理論

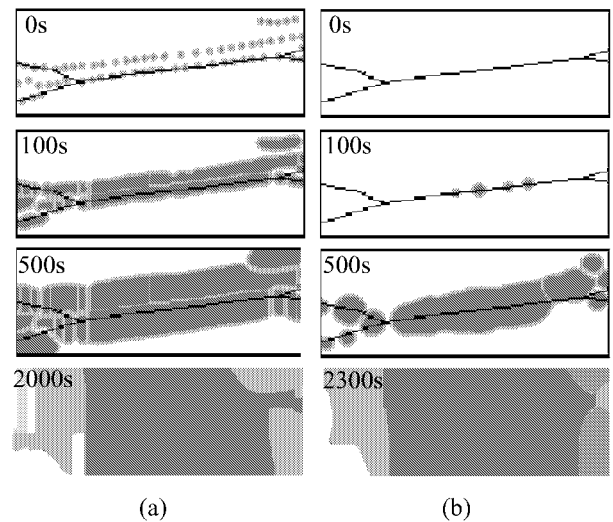


Fig. 2 Time evolutions of recrystallized grain growth and final recrystallization microstructures for (a)site saturated nucleation and (b) continuous nucleation.

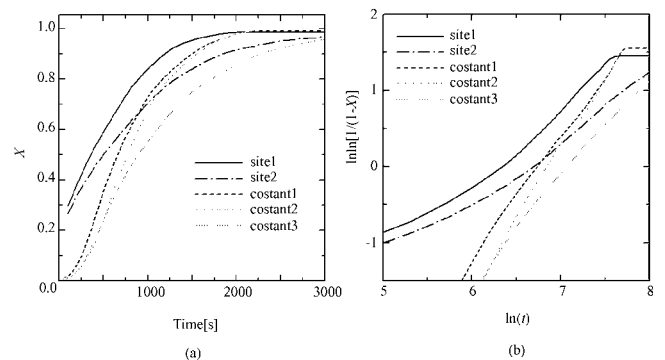


Fig. 3 Recrystallization kinetics (a)Recrystallized area fraction and (b)JMAK plots.

値においても SSN モデルよりも CNR モデルの方が Avrami 係数が大きくなることが知られている<sup>(1)</sup>。また、CNR モデルでは、図 3(a) より再結晶開始時での曲線が S 字を表しており、核の潜伏期を表現できていることがわかる。回復を考慮した場合、両モデルともに再結晶速度が遅くなり、Avrami 係数も小さくなっていることがわかる。これは、回復による蓄積エネルギー減少の影響で再結晶速度が遅くなるという事実をよく表している<sup>(6)</sup>。また、特に constant3 の直線が、再結晶終了付近で大きく勾配が小さくなって直線から外れているが、これは実際の過程においても起こることで再結晶の特徴を表しているといえる<sup>(1)</sup>。

#### 参考文献

- (1) Humphreys, F.J., Hatherly, M., Recrystallization and Related Annealing Phenomena, (1994), Elsevier Ltd.
- (2) R.D. Doherty et.al., *Mater Sci Eng.*, A238, (1997), 219-274
- (3) 比嘉ら, 機論, **69**-679, A (2003), 523-529.
- (4) J.A. Warren et.al., *Acta Mat.*, **51**, (2003), 6035-6058.
- (5) Xiaoyan Song et.al., *Mater Sci Eng.*, A332, (2002), 153-160
- (6) Paulo Rangel Rios et.al., *Materials Research.*, **8**, (2005), 225-238