

Phase Field Crystal法によるナノ多結晶体の变形特性解析

Deformation Analysis of Nanopolycrystalline Metal Using Phase Field Crystal Method

○学 廣内 智之 (神戸大・院) 正 高木 知弘 (神戸大・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 Maritime Sciences, Kobe University
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University

Key Words : Phase Field Crystal Method, Multi-Scale Model, Nano Polycrystalline Metal, Plastic Deformation, Dislocation

1 緒言

実際の材料の物理化学的特性は、材料の微視組織が有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。

現在、材料の力学的特性の評価手法として、有限要素法 (FEM) と分子動力学法 (MD) が広く用いられている。しかしながら、それぞれが対象としている時間と空間のスケールには大きな隔りがあり、その中間的なメソスケールの評価手法は確立されているとはいえないようである。そのため、MD と FEM の中間的な領域の評価を可能とするマルチスケールモデルの構築が希求されている。

本研究では、空間スケールが原子の格子間隔に対応しながら、MD よりも大きな時間間隔をとることのできる Phase Field Crystal (PFC) 法^{(1),(2)}を用いて、現実的なひずみ速度下におけるナノ多結晶体の变形挙動を評価する。

2 Phase Field Crystal 法

従来の Phase field 法は、異相界面を秩序変数 phase field ϕ の変化領域として表し、 ϕ が 0 や 1 の定常値をとるときに自由エネルギーが極小値をとるように自由エネルギー汎関数を構築する。一方、PFC 法は、単結晶中の原子配列のような周期性を表現するために、秩序変数が周期的な値をとることが大きな特徴であり、従来の手法と大きく異なる点である。本手法にて用いる秩序変数 ϕ は、時間平均化された原子の数密度を表し、保存場である。図 1 に示すように、固相領域においては原子の周期構造を表すため、 ϕ は周期的な値をとる。また、周期的な ϕ の最大値に原子が位置しており、最大値間の距離が原子間距離 a に相当する。液相領域においてはランダムな原子の配置を時間的に平均化して一定値 ϕ_0 としている。また、二つの領域に挟まれている領域を界面とする。

ここで、この秩序変数を用いた結晶の周期構造を表す最も基本的な自由エネルギー汎関数を式 (1) に示す。また、秩序変数を保存場として与えた PFC 時間発展方程式は式 (2) のようになる。

$$F = \int dV \left[\frac{\phi}{2} \{ \alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2 \} \phi + \frac{u}{4} \phi^4 \right] \quad (1)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 [\{ \alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2 \} \phi + u \phi^3] \quad (2)$$

ここで、 $\alpha \Delta T$ は駆動力、 u, λ, q_0 は平衡状態時の物質に

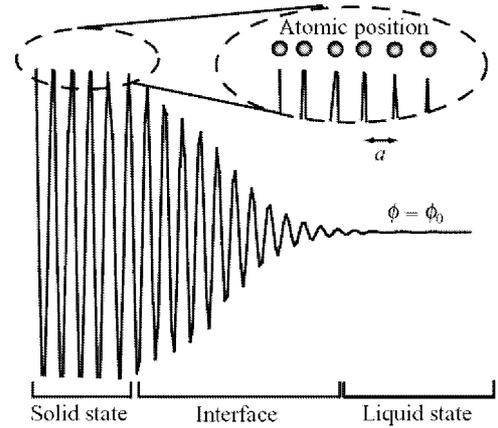


Fig. 1 Phase field profile in PFC.

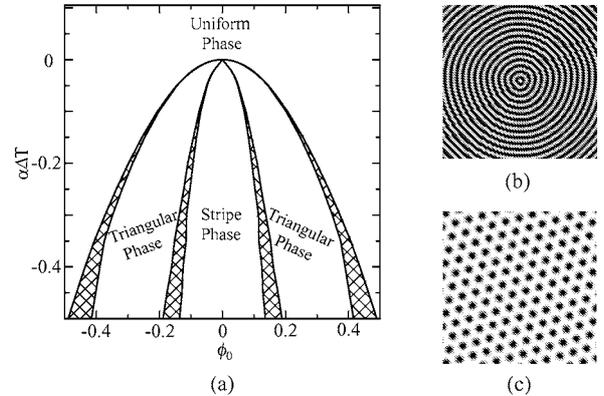


Fig. 2 (a) Phase diagram of two dimensions, and periodic structures of (b) stripe and (c) triangle.

依存するパラメータ、 Γ は ϕ のモビリティである。

$u = 1, \lambda = 1, q_0 = 2/\sqrt{3}$ とパラメータを仮定すると、式 (1) より解析的に図 2(a) に示すような 2 次元平衡状態の相図が得られる。相図の各相に対応する $\alpha \Delta T$ と ϕ_0 を用いて解析することで、図 2(b),(c) に示すような stripe 状と triangle 状の周期構造を表現することができる。また、uniform は液相状態を表している。本研究における数値解析では、この相図に基づいて triangle 状の周期構造を得るために、 $(\alpha \Delta T, \phi_0) = (-0.3, -0.31)$ としている。また、 $\Gamma = 1$ とする。

3 凝固シミュレーション

文献 [3] と同様、正六角形定形粒モデルを用いたナノ多結晶体の变形シミュレーションを行うために、凝固シ

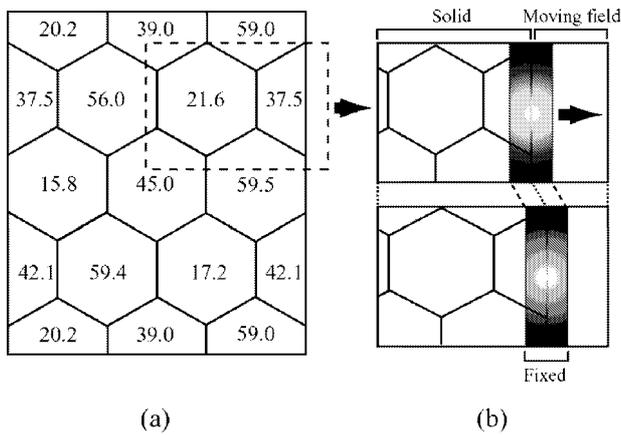


Fig. 3 (a) Hexagonal grains model and (b) the technique applying tensile deformation.

ミュレーションにより初期構造を生成する． $88\pi \times 100\pi$ の長方形解析領域を 352×400 の差分格子で分割する．図 3(a) に示すような解析モデルを作成するため，六角形の中心位置に核を配置する．また，全ての結晶粒界を高角粒界とするため，各結晶粒の方位を $0, 20, 40$ 度の 3 種類とし，乱数により図 3(a) のような結晶方位としている．核以外の解析領域を液相とし， $\phi = \phi_0$ としている．境界条件は，全方向周期境界条件を適用する．数値解析手法は，時間に関しては前進差分を用い，空間に関しては Spherical Laplacian Approximation⁽⁴⁾ を用いる．

4 変形シミュレーション

図 3(b) は多結晶体に引張り変形を与える方法を示している．凝固シミュレーションで得られた多結晶体の左右端部に，変形シミュレーションのための予備領域を加える．灰色の長方形で示す ϕ の分布を固定し，変形速度に対応させて移動させることで変形を与える．

図 4 にひずみ $\varepsilon = 0.011, 0.130$ の変形状態の局所的な自由エネルギー分布を示す．これより原子配列の周期性が乱れる領域において高いエネルギーが確認され，粒界および転位の位置を明確に確認することができる．また，変形過程では，粒界移動や粒回転が確認されたが，粒内を移動する転位は確認できなかった．粒の 1 辺が 14 個程度のナノ多結晶体であるため，粒間変形⁽³⁾ が支配的な変形モードとなっていると考えられる．

図 4(a) の正方形領域では，粒の回転による粗大化が顕著に生じている．この過程を詳細に見るため，図 5 は図 4(a) 内の正方形領域の拡大図を表示している．図 5(a) の粒 A, B は方位差が比較的小さく，粒 C, D はこれらの粒に対して大きな初期方位差を有している．次に，原子に沿って引かれた線分 W, X, Y, Z を用いて粒方位を調べ，各々の図の右上に配置した挿入図に方位差を示している．図 5(b) - (c) において，方位差の小さな粒 A, B で粒回転が生じている．また，変形が進むにつれて粒 A, B と粒 C, D の間の粒界エネルギーのバランスにより，図 5(b) の黒丸で示す三重点が移動している．このため，粒 A, B 間の粒界が三重点の移動に応じて変位することが確認できる．図 5(d) - (e) では，粒 A, B の回転が更に進み，方位差が一層小さくなるのが伺える．また，図 5(d) の黒い正方形領域で示す転位が，粒 A, E 間の粒界に向かって

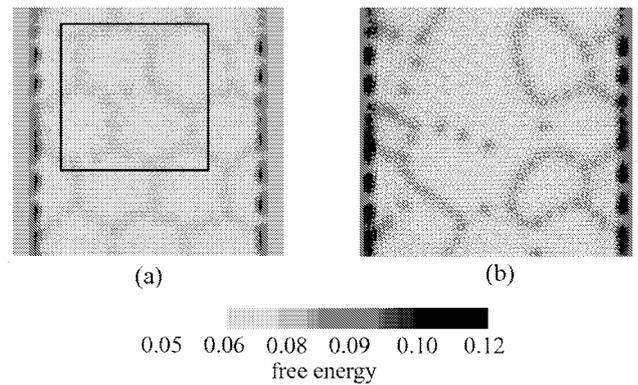


Fig. 4 Free energy distributions at deformation state with (a) $\varepsilon = 0.011$ and (b) $\varepsilon = 0.130$.

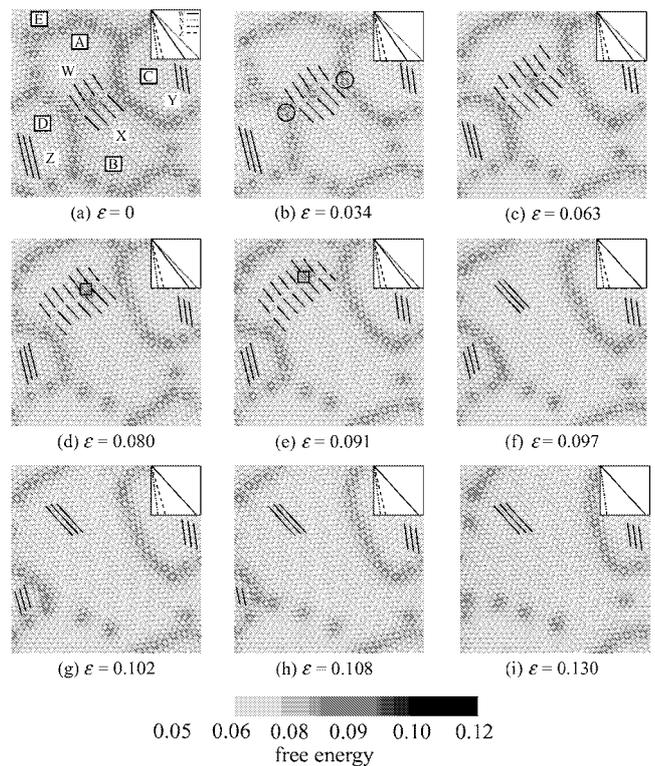


Fig. 5 Close-up views of square region in Fig. 4

急速に移動し吸収され，粒 A, B 間の粒界が消滅することが分かる．この結果，粒 A, B が融合して一つの粒となる (図 5(f))．粒 C, D は粒回転が顕著となる粒 A, B に隣接しているが，粒 C, D の粒回転は確認できない．これより粒回転は初期方位差の小さい粒間で生じ易いことが分かる．図 5(g) - (i) においては，粒 A, B 間の粒界の消失により三重点が完全に失われるため，融合粒 A-B の周りの粒界は不安定になる．特に，融合粒 A-B と粒 C の間にある粒界は，曲率を駆動力として加速度的に移動し，融合粒 A-B が更に粗大化することが分かる．

参考文献

- 1) K. R. Elder, M. Katatowski, M. Haataja, and M. Grant, Phys. Rev. Lett. 88, 245701 (2002).
- 2) K. R. Elder and M. Grant, Phys. Rev. E 70, 051605 (2004).
- 3) T. Shimokawa, A. Nakatani, and H. Kitagawa, Phys. Rev. B 71, 224110 (2005).
- 4) Y. Oono and S. Puri, Phys. Rev. A 38, 434 (1988).