

# 動的再結晶過程の Phase-Field シミュレーション

## Phase-Field Simulation of Dynamic Recrystallization Process

学 久國陽介 (神戸大・院) 正 高木知弘 (神戸大・院)

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 Maritime Sciences, Kobe University, 5-1-1, Fukaeminami, Higashinada, Kobe, Hyogo

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

Key Words: Phase Field Method, 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、材料が持つ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あるいは動的再結晶が支配的になることが知られている。すなわち、中～低SFE材においては、転位の拡張傾向が強まり、回復に伴う転位の再配列において、転位の上昇運動が起こりにくくなるために動的回復が困難になり、その結果、蓄積された転位が駆動力となって動的再結晶が生じる。このように動的再結晶は複雑な現象であり、その詳細なメカニズム解明のために実験<sup>(1)</sup>および数値的<sup>(2)</sup>な面からの研究が進められている。

本研究では、再結晶核生成および再結晶粒成長をPhase-Field法を用いてモデル化し、動的再結晶過程における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。特に本稿では、力学的応答の初期粒径依存性について基本的な特性を検討する。

### 2. Phase-Field モデリング

文献[3]で構築したMulti-Phase-Fieldモデルを用いて、再結晶粒成長を表現する。ここで、phase field  $\phi_i$  の時間発展方程式は次式のように与えられる。

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

ここで、 $\Delta E_{ij}$ ,  $M_{ij}^\phi$ ,  $W_{ij}$ ,  $a_{ij}$  はそれぞれ駆動力、モビリティ、エネルギー障壁の高さ、勾配係数であり、それぞれ次のように関連付けられる。

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

$$W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}$$

ここで、 $\tau$ ,  $\delta$ ,  $M_{ij}$ ,  $\gamma_{ij}$  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。界面幅は差分格子間距離 $\Delta x$ の7倍、 $\delta = 7\Delta x$ としている。

再結晶粒の核生成は、バルジング機構により引き起こされるとし、高角粒界上の転位密度が式(3)で表される臨界値に達した場合に核を生成させる<sup>(2)</sup>。

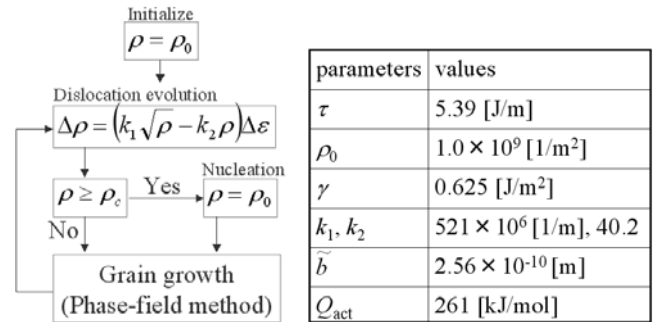


Fig.1 Numerical Procedure. Table.1 Input parameters.

$$\rho_c = \left( \frac{20\gamma\dot{\epsilon}}{3\tilde{b}LM\tau^2} \right)^{1/3} \quad (3)$$

ここで、 $\dot{\epsilon}$ ,  $\tilde{b}$ ,  $L$  はそれぞれ、ひずみ速度、バーガースペクトルの大きさ、転位の平均自由行程である。

核生成速度は、温度とひずみ速度の関数と仮定し、次式を用いる。

$$\dot{n} = c\dot{\epsilon}^m \exp\left(-\frac{Q_{act}}{RT}\right) \quad (4)$$

ここで、 $c$ ,  $Q_{act}$  は定数、活性化エネルギーである。

転位の蓄積に関しては Kocks, Mecking が提唱した次式の KM モデルを用いる。

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho \quad (5)$$

ここで、 $k_1$  は定数、 $k_2$  は温度とひずみ速度の関数であり、いずれも実験値より定められる。

解析手順を図 1 に示す。式(4)のKMモデルに従って転位密度を進展させ、転位密度が核生成条件である臨界転位密度 $\rho_c$ に達した格子点上に核を配置する。その後、Phase-Field法によって粒成長させ、この手順を所定のひずみ値まで繰返し行う。

### 3. シミュレーションモデル

初期粒径の影響を検討するため、初期平均粒径 $D_0$ が 24, 30, 57  $\mu\text{m}$ となるよう初期組織を作成する。解析領域は  $200 \times 200 \mu\text{m}$  ( $400 \times 400$  lattices) とし、 $x, y$  方向端面を周期境界としている。OFHC銅を対象とし、各物性値を表 1 に示す。温度を 775 K、ひずみ速度を  $2.0 \times 10^{-3}$  1/s とし、ひずみ 0.5 まで解析を行った。なお核生成は、粒界上に円形の再結晶粒を配置するが、動的再結晶の駆動力は非常に小さいため、臨界半径が非常に大きく

なる．そこで， $\Delta E_{ij}=4\Delta E_{ij}$ とすることで核サイズを小さくし， $M_{ij}^{\phi}=1/4 M_{ij}^{\phi}$ により粒成長速度を調整している．

#### 4. シミュレーション結果と考察

解析の結果得られた真応力-真ひずみ曲線を図2に示す．真応力は次式により解析領域全体の平均転位密度から算出する．

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (6)$$

いずれの初期粒径においても，ひずみが0.12に達したあたりで応力が最大となった後，再結晶粒の成長が顕著になることで平均転位密度が減少し，ひずみ0.16から0.18あたりまで応力の減少が続く．ほぼ全領域が再結晶粒で満たされると，変形による転位の蓄積が支配的になり，再び応力が増加していく．その後 $D_0 = 24, 30 \mu\text{m}$ の場合では，ひずみ0.25あたりで応力の増加がとまり，再び再結晶粒成長が顕著になることで応力が減少している．動的再結晶過程は，変形による応力の増加と再結晶粒成長による減少のサイクルを繰り返して進行していく．応力の増加と減少は変形が進むにつれて減衰していくが，初期粒径によって減衰の度合いが異なり，初期粒径が大きいほど，早い段階で応力がほぼ一定に落ち着く傾向が確認できる．また，初期粒径が大きいほど応力の極大，極小値の差が小さいこともみてとれる．

続いて，より詳細な検討をするために各粒径による再結晶分率の発展を比較する．図3は各粒径における，再結晶分率の変化を示している．再結晶分率は再結晶粒が占める格子点数を全体の格子点数で割ることで求めている．初期粒径が大きいほど，再結晶がゆっくり進行していくことがわかる．したがって，初期粒径が大きいほど，再結晶が完了する前に新たな再結晶が進行する可能性が高まる傾向が確認できる．このような場合，変形による転位密度の増加と再結晶粒成長による減少とが同程度に進むために，応力-ひずみ曲線における応力の増減が穏やかになる．この傾向は図2においても確認できた．

併せて，ひずみ0.12から0.18における微視組織を図4に示す． $D_0 = 57 \mu\text{m}$ の場合，ひずみ0.18においても初期結晶粒が残っているが， $D_0 = 24 \mu\text{m}$ では，ひずみ0.16においてほぼ全体にわたって再結晶が完了している．再結晶核は主にバルジング機構により粒界より成長していく．初期粒径が小さい場合では，解析領域を粒界が細かくわたることから，再結晶粒が広く分布し，比較的早い段階で再結晶を完了する傾向がうかがえる．

#### 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, A. Yamanaka and Y. Tomita, Proc. ATEMA (2007), (in press).

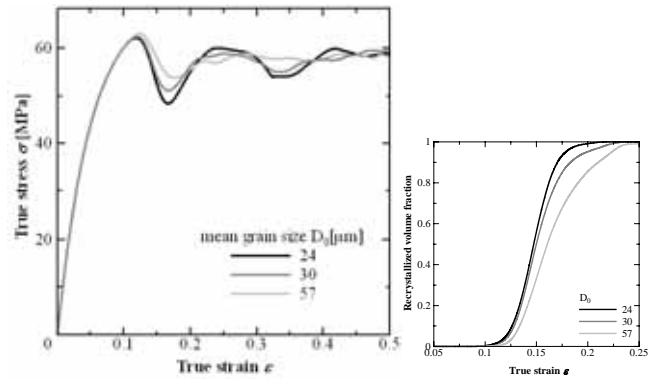


Fig.2 Stress strain curves. Fig.3 Recrystallized volume fraction.

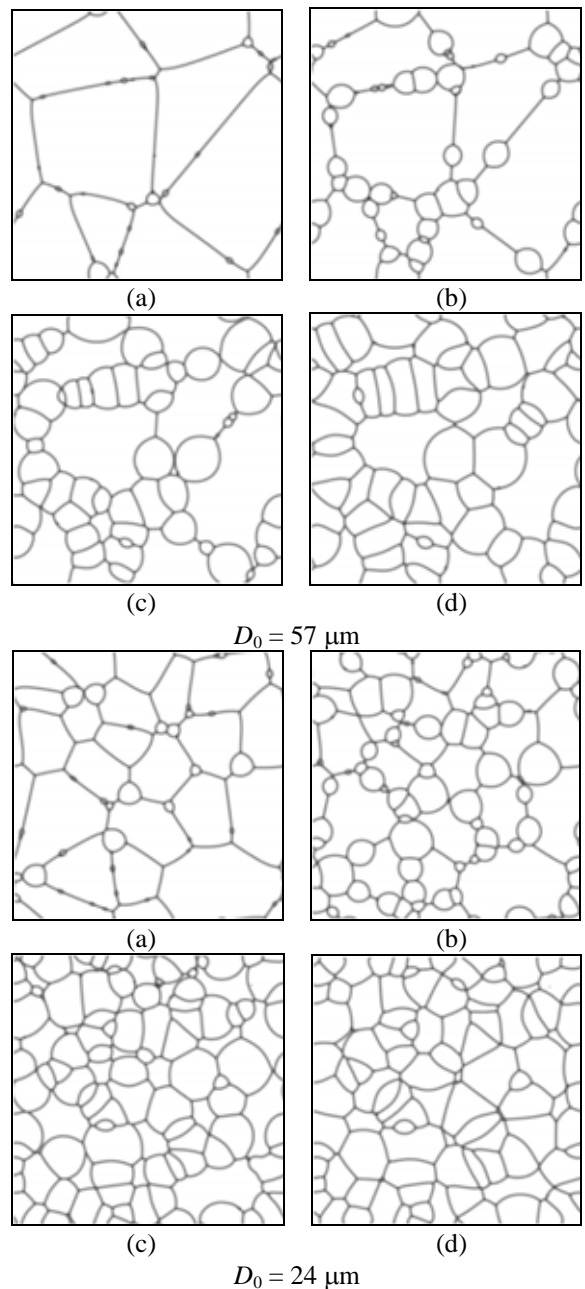


Fig.4 Evolution of microstructures. (a)  $\epsilon=0.12$ , (b) 0.14, (c) 0.16, and (d) 0.18.