

多結晶体の形成過程と変形過程の Phase Field Crystal シミュレーション

Phase Field Crystal Simulation During Formation and Deformation of Polycrystal

○ 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

As a numerical tool to investigate material properties, the finite element method (FEM) and the molecular dynamics (MD) method are used widely. However, there is so much difference in space and time scales between the both methods, and it is difficult to perform the numerical simulations in the intermediate scale. The Phase Field Crystal (PFC) method, which has a periodic order parameter that represents a local-time-averaged atomic density field, allows a description of system having diffusive times and interatomic length scales. In this study, we employ PFC model to investigate the deformation behavior of nano-polycrystal structure under the realistic deformation velocity. The polycrystal structures with regular hexagonal grains are prepared by performing solidification PFC simulations.

Key Words: Phase Field Crystal Method, Multi-Scale Model, 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たりがあり、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変形挙動を評価する。変形シミュレーションに用いる多結晶体は粒方位を制御した凝固シミュレーションにより生成する。

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 は周期的な値をとり、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している。

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

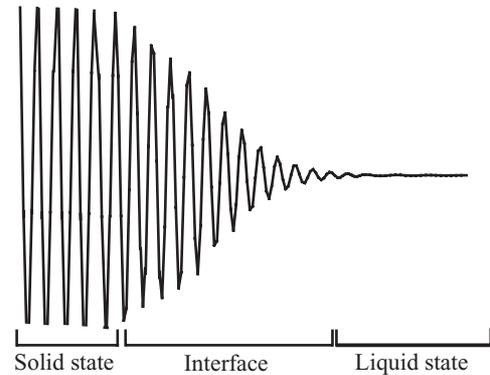


Fig. 1 Phase field profile in PFC.

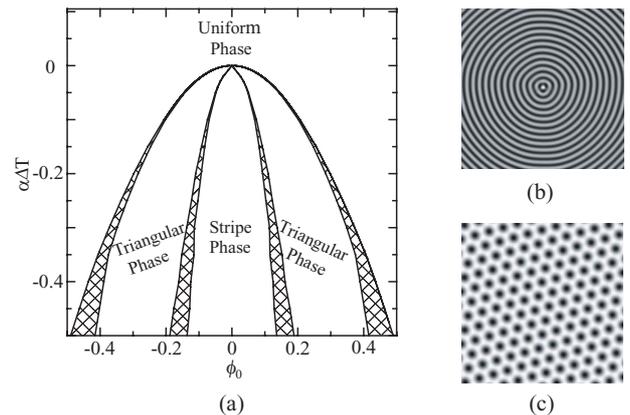


Fig. 2 (a) Phase diagram of two dimensions, and periodic structures of (b) stripe and (c) triangle.

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

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 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 3 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, 正六角形定型粒モデルを用いたナノ多結晶体の変形シミュレーションを行うために, 凝固シミュレーションにより初期構造を生成する. $88\pi \times 100\pi$ の正方形解析領域を 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 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.

図 4 に図 3 中の正方形領域における凝固組織の時間発展を示している. 図 4(a) - (c) において, それぞれの結晶方位を有する固相領域が成長し, 図 4(d) で固相同士が衝突している. 異なる結晶方位を有する固相が衝突した領域では phase field の周期性が乱れており, 時間の経過とともにその領域は小さくなり (図 4(e)), 最終的に図 4(f) のような原子配列の乱れたシャープな結晶粒界が形成されている.

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. 図 3(b) の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 5 にひずみ $\varepsilon = 0.011, 0.125$ 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, 粒界近傍において高いエネルギー領域が確認され, 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, 粒界移動と粒回転が変形挙動を支配しており, 粒界すべりも確認された. しかしながら, 粒内を移動する転位は確認されなかった. 本モデルは, 粒の一辺に 14 個程度の原子を配置した超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.

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).

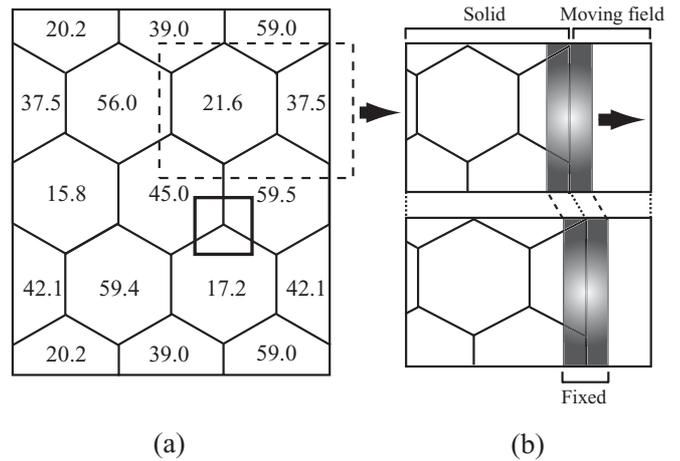


Fig. 3 (a) Hexagonal grains model and (b) the technique applying tensile deformation.

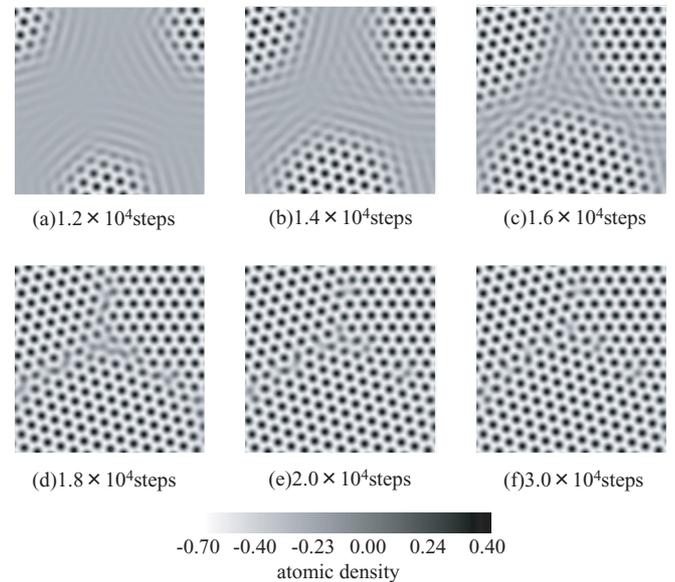


Fig. 4 Close-up views of square region in Fig. 3

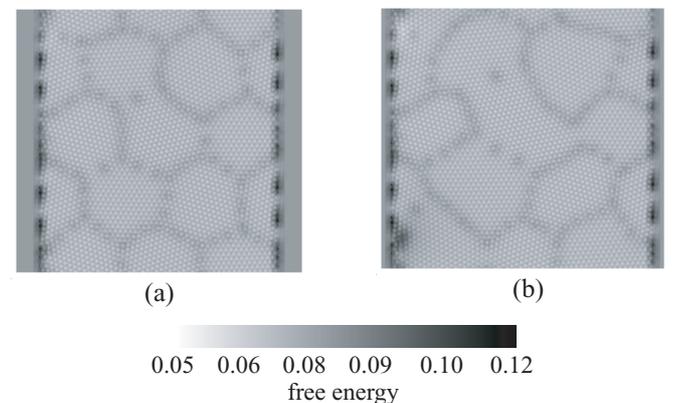


Fig. 5 Free energy distributions at deformation state with (a) $\varepsilon = 0.011$ and (b) $\varepsilon = 0.125$.