

# Phase-field 法による変形組織にもとづく再結晶組織予測

## Predictions of Recrystallization Microstructure Based on Deformation Microstructure Using Phase-field Method

○ 学 田中 克昌 (神戸大・院)      正 高木 知弘 (神戸大・院)  
正 富田 佳宏 (神戸大・院)

Katsumasa TANAKA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501  
Tomohiro TAKAKI, Graduate School of Maritime Sciences, Kobe University, Higashinada, Kobe, 658-0022  
Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Engineering, Kobe University, Nada, Kobe, 657-8501

The microstructures formed during annealing are significantly affected by the pre-deformation microstructures, since the recrystallized grains originate from dislocation cells or subgrains and subsequent grow driven by the stored energy resulted from dislocation accumulated during deformation. In this study, we develop a numerical model and computational procedure for static recrystallization using a phase-field model coupled with crystal plasticity theory. The microstructure and accumulated dislocation density during deformation of a polycrystalline metal are simulated using finite element method based on the strain gradient crystal plasticity theory. Phase-field simulation of the nucleation and growth of recrystallized grain is performed using the crystallographic orientation and stored energy calculated by crystal plasticity finite element simulation. Through this computational procedure, we can predict the final recrystallization microstructure without introduction of such experimental data due to EBSD(Electron Back-Scattering Diffraction) Analysis.

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

### 1 緒言

塑性変形を受けた金属材料を焼なます際に生じる再結晶粒の成長挙動および再結晶組織は、加工時の変形組織に強く依存することが知られている<sup>(1)</sup>。現在、再結晶を予測するために数理モデルを用いた研究が数多く行われているが、変形組織の情報を EBSD 解析などの実験結果から得ているものが多い。しかしながら、より体系的な再結晶組織の予測・制御を行うためには、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解析手法の構築が必要である。

そこで本研究では、結晶塑性理論<sup>(2)</sup>を用いて多結晶体の変形特性を評価、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し、再結晶組織を予測することを目的としている。

### 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>(2)</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<sup>(1)</sup>。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、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、 $\phi$  と  $\theta$  の時間発展方程式は次のようになる。

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

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

$M_\phi$  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  $M_\theta = (1 - p(\phi))M_\phi$  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

初めに結晶塑性解析において材料の変形特性を評価する。ランダムに結晶方位を与えた 23, 77 結晶粒を有する多結晶体を解析対象とする。図 1 に示す正方形領域を解析範囲とし、この領域を  $64 \times 64$  の Crossed-Triangles 要素で分割する。解析は、2 すべり系平面ひずみ問題とし

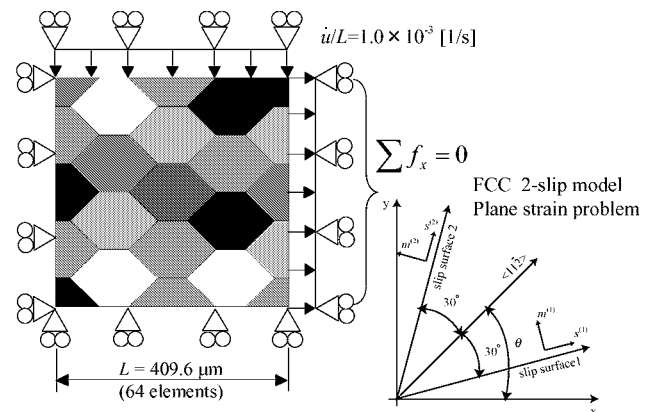


Fig. 1 Polycrystal computation model with 23 regular grains.

て純アルミ材を想定して行う。また境界条件として、右端面が直線を保ちかつ  $x$  方向節点力の総和が零となるようにしている。ここで、結晶方位  $\theta$  は図 1 に示すように  $\{111\}$  面を紙面と考え、 $\langle 11\bar{2} \rangle$  方向と  $x$  軸とのなす角度と定義している。図 2 に 50% 圧縮変形後の結晶方位分布を示す。粒界だけでなく粒内に結晶方位差を生じていることが観察できる。

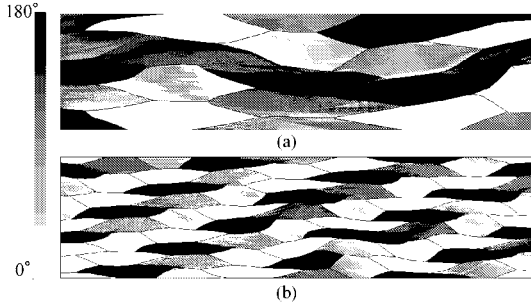


Fig. 2 Crystallographic orientation at 50% compression of (a) 23 grains and (b) 77 grains.

図 2 の全領域を解析対象として再結晶 Phase-field 解析を行う。核生成サイトは、(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  $4\mu\text{m}$  以上の全条件を満足する格子点と仮定する。核生成モデルには解析開始時にすべての核を配置する Site Saturated Nucleation (SSN) モデルと、核を時間の経過と共に生成させる Constant Nucleation Rate (CNR) モデルを用いる。CNR モデルでは、核生成速度を  $\dot{N}(1-X)$  としている。ここで、 $\dot{N}$  は核生成速度、 $X$  は再結晶率を表しており、再結晶が進むとともに核生成速度が遅くなるという実験結果を表現している<sup>(1)</sup>。なお、本解析では  $\dot{N} = 5 [1/\text{s}]$  と定める。図 3, 4 に核生成モデルとして、それぞれ SSN モデル、CNR モデルを用いた解析結果を示す。核は粒界近傍および粒内での結晶方位差が大きい領域に集中して生成しており、変形組織を考慮した核生成を表現できている。また、図 4 から CNR モデルでは時間の経過と共に核生成数が減少していることが確認できる。さらに核生成は、粒界だけでなく、変形により生じた粒内の結晶方位差が大きく、蓄積転位密度が高い粒内の領域にも集中していることが確認でき、結晶方位差大、高転位密度領域が優良な核生成サイトに成り得るという実験結果をよく再現できている<sup>(4)</sup>。最後に、再結晶組織の比較を図 5 より行う。(a) と (b)、(c) と (d) を比較することで、77 結晶粒モデルの方が 23 結晶粒モデルよりもより等軸的で微細な再結晶組織を有していることがわかる。これは、77 結晶粒の元の結晶粒が微細で、粒内に生成した核の影響が少ないためである。この結果から、元の結晶粒が微細なほど均等かつ微細な再結晶組織が形成されると予測できる。

#### 参考文献

- (1) Humphreys, F.J. et al., *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, (1994), Elsevier Ltd.
- (2) Higa, Y. et al., *Trans. JSME.*, **A69**, (2003), 523-529.
- (3) Warren, J.A. et al., *Acta Mat.*, **51**, (2003), 6035-6058.
- (4) Doherty, R.D. et al., *Mater Sci Eng.*, **A238**, (1997), 219-274

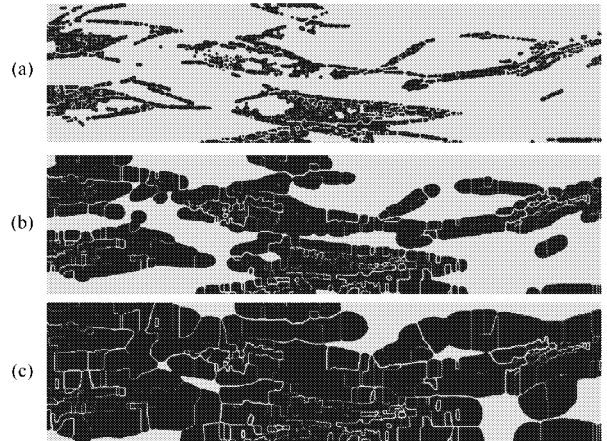


Fig. 3 Recrystallized microstructure evolution for 23-grain model using SSN.  $t =$  (a) 100, (b) 500 and (c) 1500 s.

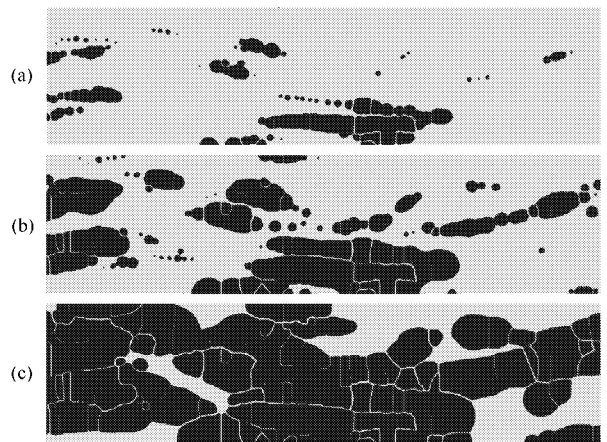


Fig. 4 Recrystallized microstructure evolution for 23-grain model using CNR.  $t =$  (a) 500, (b) 1000 and (c) 2000 s.

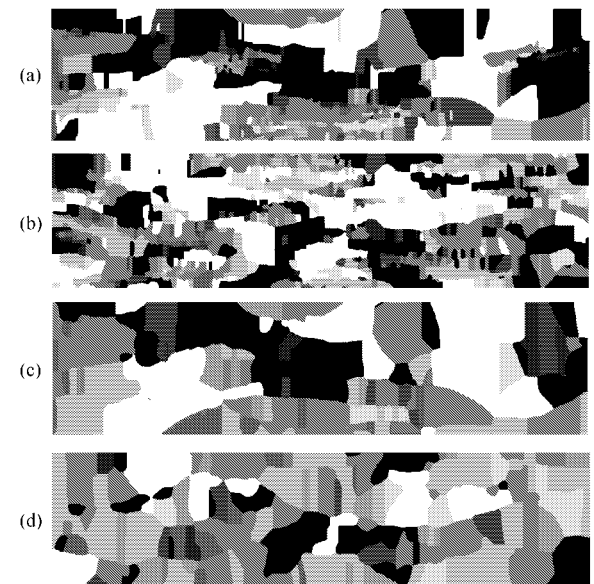


Fig. 5 Final recrystallized microstructures of (a) 23-grain model using SSN, (b) 77-grain model using SSN, (c) 23-grain model using CNR and (d) 77-grain model using CNR.