

Phase-field 法と結晶塑性論を用いた動的再結晶モデルの構築 Dynamic Recrystallization Phase-Field Model based on Crystal Plasticity

高木 知弘 (神戸大・海科) 山中 晃徳 (神戸大・院) 比嘉 吉一 (沖縄高専) 富田 佳宏 (神戸大・工)
Tomohiro TAKAKI, Faculty of Maritime Sciences, Kobe University
Akinori YAMANAKA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University
Yoshikazu HIGA, Department of Mechanical System Engineering, Okinawa National College of Technology
Yoshihiro TOMITA, Faculty of Engineering, Kobe University
TEL/FAX: 078-431-4693, E-mail: takaki@maritime.kobe-u.ac.jp

Dynamic recrystallization is a common phenomenon, when a metallic material with moderate-to-low stacking fault energy is deformed plastically under temperature over about $0.5T_m$. Phase-field model coupled with crystal plasticity theory during dynamic recrystallization process is developed in order to simulate the microstructure evolution and mechanical behavior simultaneously. In this model, the work hardening caused by dislocations is simulated by finite element method based on a crystal plasticity theory and the nucleation and grain growth of recrystallized grain, or softening process, are calculated by phase-field method.

1. 緒言

積層欠陥エネルギー(SFE)が比較的小さい金属材料(Cu, Ni, オーステナイト鋼など)を $0.5T_m$ (T_m : 融点) 程度以上の高い温度領域で塑性変形させると、動的再結晶(Dynamic Recrystallization: DRX)が生じることが知られており、冷間加工後の熱処理中に生じる静的再結晶(Static Recrystallization)と区別している。動的再結晶は塑性変形中に、転位をほとんど含まない再結晶核が生成し成長する現象である。この粒成長の際、再結晶粒内の転位密度は一定ではなく、塑性変形の進行に伴い徐々に高くなる点が静的再結晶と異なる。動的再結晶が生じると材料が軟化し、塑性加工時に必要となる荷重を低減することが可能となることから、熱間加工が広く採用されている。しかしながら、動的再結晶は力学場の発展と材料組織変化が相互に影響し合う極めて複雑な現象であるため、そこで生じる微視組織の予測および制御は、実験による評価だけでは困難であり、コンピュータを用いた数値シミュレーションにより可能となる。

静的再結晶の材質予測は、冷間加工後の材料組織データを実験的に、もしくは結晶塑性有限要素法などにより解析的に取得し、入力データとして Monte Carlo (MC)法¹⁾、Cellular automaton (CA)法²⁾、Phase-field (PF)法³⁾などで用いることで、変形組織を反映させた再結晶粒の生成および成長シミュレーションが行われている。この場合、統一的な核生成条件は現在でも確立されていないが、それ以外の手法はおおむね構築されているといえる。一方、動的再結晶は材料工学側からの CA 法⁴⁾や MC⁵⁾法を用いた組織発展を中心とするアプローチと、力学側からの構成式によるアプローチ⁶⁾がある。前者は再結晶粒の生成と成長を再現できるが、核生成条件および粒成長駆動力となる転位密度の算出に用いる応力場の計算に大きな仮定を用いており、精度が高いとはいえない。後者は実際の構造物の熱間加工シミュレーション⁷⁾にも応用され成功を収めているが、粒サイズや再結晶体積分率を内部状態変数として導入しており、これらの発展を実験により求められる巨視的な応力-ひずみ関係より同定しているため、詳細な微視組織発展情報を得ることはできない。

本研究では、動的再結晶過程に生じる微視構造変化と力学場発展の同時評価を可能とする、これまでの手法より精度の高いシミュレーションモデルを構築し、動的再結晶メカニズムの解明および材質予測を行うことを目的としてい

る。弾塑性有限要素法と CA 法を連成させた手法⁸⁾が現在検討されているが、この手法では結晶方位を陽に決定することができず、また CA 法は結晶粒の曲率を表現することが困難であるため、精度の高い評価は困難であると思われる。我々のグループでは、転位の蓄積による加工硬化を結晶塑性論に基づく有限要素法により、再結晶粒の生成および成長を Phase-field 法によりシミュレートする手法を構築する。

2. 動的再結晶

図 1⁹⁾ は高温環境下における応力-ひずみ関係(SS 曲線)を模式的に示したものである。高 SFE 材 (Al, フェライト鋼など) では、転位の上昇運動や交差すべりにより動的回復(dynamic recovery)が速く生じ、加工硬化と動的回復がつり合い動的再結晶を生じることなくピーク応力値 σ_c で一定となる。一方、中低 SFE 材は、 $Z = \dot{\epsilon} \exp(Q/RT)$ で表される Zener-Hollomon パラメータ Z ¹⁰⁾ が高い場合 (ひずみ速度: 低, 温度: 高) は SS 曲線が一つのピークを示し、 Z 値が低い場合 (ひずみ速度: 高, 温度: 低) は複数のピークを示す。いずれも最大応力値 σ_{max} の少し前で生じるある臨界値 σ_c に達すると再結晶粒が生成し成長をはじめ、 σ_{max} に達した後軟化を開始し、最終的に定常応力 σ_s となる。 Z が低い条件では、再結晶粒の生成と成長が一度では無く、転位密度の高くなった再結晶粒界から新たな再結晶粒が生成・成長するため、図 1(b)のように SS 曲線が複数のピーク値を呈する。

本研究では、図 1(b)で示される中低 SFE 材を対象とし、動的再結晶を精度良く再現することの可能な数値モデルの構築を試みる。

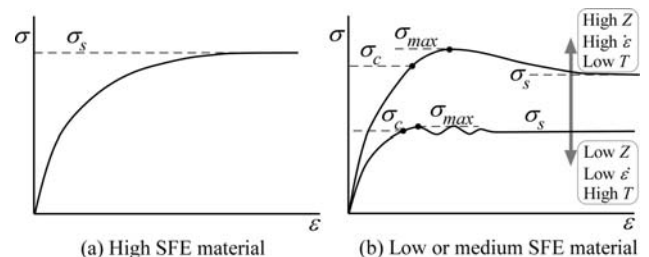


Fig. 1 Schematic stress-strain curves under hot working.

3. 結晶塑性理論

図1からも分かるように、高温環境下におけるSS曲線はひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ と温度 T に依存する。ここでは、Nemat-Nasserら¹¹⁾によって提案された構成式を用いる。

すべり系(a)における臨界分解せん断応力 $\tau^{(a)}$ は次式で表される。

$$\tau^{(a)} = \tau^{*(a)} + \tau_a^{(a)} \quad (1)$$

ここで、 $\tau^{*(a)}$ は短距離障害による抵抗を表し有効応力と呼ばれる。 $\tau_a^{(a)}$ は長距離障害による抵抗を表す。 $\tau^{(a)}$ は熱活性化過程によって克服される。Kocksらの式を用いると、活性化エネルギー $\Delta G^{(a)}$ は次式で表される。

$$\Delta G^{(a)} = G_0^{(a)} \left\{ 1 - \left(\frac{\tau^{*(a)}}{\hat{\tau}^{(a)}} \right)^p \right\}^q \quad (2)$$

ここで、 $\hat{\tau}^{(a)}$ は絶対零度における $\tau^{(a)}$ の値、 $G_0^{(a)}$ は外力の作用無く障害を乗り越えるために必要な全自由エネルギー、 p と q は定数である。すべり系(a)のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ は、活性化エントロピーとOrowanの式より、

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_{ref}^{(a)} \exp\left(-\Delta G^{(a)}/kT\right) \quad (3)$$

と表される。ここで、 $\dot{\gamma}_{ref}^{(a)}$ は基準せん断ひずみ速度、 k はボルツマン定数である。式(2)を式(3)に代入すると次式を得る。

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_{ref}^{(a)} \exp\left(-\frac{G_0^{(a)}}{kT} \left\{ 1 - \left(\frac{\tau^{*(a)}}{\hat{\tau}^{(a)}} \right)^p \right\}^q\right) \quad (4)$$

また、 $\tau_a^{(a)}$ は粒界や遠方の転位により生じる弾性場により生じる可動転位への抵抗である。せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ と $\tau^{(a)}$ の符号が同じであることを考慮し、式(1)を式(4)に代入すると、次式を得る。

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \text{sgn}(\tau^{(a)}) \dot{\gamma}_{ref}^{(a)} \exp\left(-\frac{G_0^{(a)}}{kT} \left\{ 1 - \left(\frac{|\tau^{(a)}| - \tau_a^{(a)}}{\hat{\tau}^{(a)}} \right)^p \right\}^q\right) \quad (4)$$

この式を有限変形を考慮した単結晶の構成式に導入し、接線係数法を用い、仮想仕事の原理式に導入することで、ひずみ速度と温度に依存した多結晶体の変形挙動を評価可能な有限要素方程式を得ることができる。

4. Phase-Field 法

結晶塑性解析により算出される転位密度を用いて再結晶粒の生成・成長シミュレーションを行う。再結晶核はバルジングにより高角粒界上のみ発生するとし、転位密度が

$$\rho_c = (80\sigma\dot{\gamma}/3b^5LM\mu^2)^{1/3} \quad (5)$$

に達した点に核を配置する^{8,9)}。ここで、 σ は粒界エネルギー、 b はバーガースペクトルの大きさ、 L は可動転位の平均運動距離、 M は粒界モビリティ、 μ はせん断弾性係数である。

Phase-field 方程式は、次に示す自由エネルギー汎関数から導く。

$$F = \int_V \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(-\frac{a_{ij}^2}{2} |\nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j| + W_{ij} g(\phi_i, \phi_j) \right) + f(\phi_i, \phi_j) \right] dV \quad (6)$$

ここで、 ϕ_i は n 個ある結晶方位の i 番目の方位を有する粒を表し、ある点が i 番目の方位を有する粒内にある場合 $\phi_i =$

1, それ以外の粒内では $\phi_i = 0$ となる。ここで、 $\phi_1 + \phi_2 + \dots + \phi_n = 1$ を満たす必要がある。また、 a_{ij} と W_{ij} はそれぞれ勾配係数とエネルギー障壁であり、粒界エネルギー σ_{ij} と粒界幅 δ_{ij} を用いて表される。 $g(\phi_i, \phi_j)$ は $g(\phi_i, \phi_j) = \phi_i \phi_j$ を用いる。 $f(\phi_i, \phi_j)$ は粒 ϕ_i と粒 ϕ_j 内の転位密度から算出される蓄積エネルギー差により表される粒界移動の駆動力を表す。

粒界の移動速度は粒界が曲率を有さない場合、

$$V = M\Delta E \quad (7)$$

で与えられるとする。ここで、 M は $M = \delta_b D_b b / kT$ で表される粒界モビリティ、 ΔE は粒界両サイドの粒内における蓄積エネルギーの差である。なお、 δ_b は特徴粒界厚さ、 D_b は粒界拡散係数である。式(6)の時間発展式の一次元定常成長式と、式(7)を比較することで粒 ϕ_i と粒 ϕ_j 間の粒界のモビリティ $M_{\phi_i \phi_j}$ を決定することができる。

5. シミュレーション手順

結晶塑性解析で算出される転位密度をPFシミュレーションにおいて核生成条件判定と粒成長駆動力として用いる。また、生成される再結晶粒の方位は変形組織中であると仮定し、結晶塑性解析の結果を用いる。PFシミュレーションで成長した再結晶粒内に位置する結晶塑性で用いる要素内では、転位密度を減少させ、加工軟化を再現する。これらの手順を各時間ステップ毎に行い、材料組織と力学場の発展を連成した動的再結晶シミュレーションを可能とする。詳細な手順と結果は発表当日に示す。

参考文献

- 1) D. J. Srolovitz, et. al: Computer simulation recrystallization-I. Homogeneous nucleation and growth, Acta Metall., 34, pp.1833-1845, 1986.
- 2) H. W. Hesselbarth and I. R. Gobel: Simulation of recrystallization by cellular automata, Acta Metall. Mater., 39, pp.2135-2143, 1991.
- 3) T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Higa and Y. Tomita: Proceedings of Third International Conference on Multiscale Materials Modeling, pp. 562-565, 2006.
- 4) R. Ding and Z. X. Guo: Coupled quantitative simulation of microstructural evolution and plastic flow during dynamic crystallization, 49, pp.3163-3175, 2001.
- 5) P. Peczek: A monte carlo study of influence of deformation temperature on dynamic recrystallization, Acta Metall. Mater., 43, pp.1279-1291, 1995.
- 6) E. P. Busso: A continuum theory for dynamic recrystallization with microstructure-related length scales, Int. J. Plasticity, 14, pp.319-353, 1998.
- 7) N. Bontcheva and G. Petzov: Microstructure evolution during metal forming processes, Comp. Mater. Sci., 28, pp.563-573, 2003.
- 8) M. Qian and Z. X. Guo: Multiscale modeling of microstructural evolution during dynamic recrystallisation coupling FEM and CA, Proceedings of Third International Conference on Multiscale Materials Modeling, pp. 89-96, 2006.
- 9) W. Roberts and B. Ahlblom: A nucleation criterion for dynamic recrystallization during hot working, 26, pp.801-813, 1987.
- 10) F. J. Humphreys and M. Hatherly: Recrystallization and related annealing phenomena 2nd edition, Elsevier, 2004.
- 11) S. Nemat-Nasser and L. Ni and T. Okinaka: A constitutive model for fcc crystals with application to polycrystalline OFHC copper, Mechanics of Materials, 30, pp.325-341, 1998.