

Phase-field 法と結晶塑性論を用いた再結晶組織予測
 Prediction of Recrystallization Microstructure by Coupling Numerical Model
 Using Phase-Field Method and Crystal Plasticity Theory

神戸大学・海科 高木知弘, 工 富田佳宏

1. 緒言

Phase-field 法は、相界面や粒界の時間とともに移動を、付加的に導入した秩序変数(phase field)の時間発展として表現することから、非常に複雑な材料の形態や組織の時間変化を比較的容易にシミュレートすることが可能である。このため、結晶塑性論や均質化法など力学的な評価手法とリンクして用いることで、これまで異なった学問体系で行われてきた組織形成と力学的特性を連続的に評価することができ、より体系的な材料組織設計および材質予測を行うことが可能になると考える。

ここでは、静的再結晶過程に着目し、結晶塑性有限要素解析と Phase-field 法を連成した数値モデルを用いることで、材料の変形組織を考慮した再結晶組織予測手法について紹介する。

2. シミュレーション手順

はじめに、多結晶金属材料の変形挙動を結晶塑性有限要素法により評価する。ここでは、ひずみ勾配結晶塑性論を用いることで、加工硬化特性の粒サイズ依存性を評価可能としている。結晶塑性有限要素シミュレーションで得られる結晶方位と転位密度を再結晶 Phase-field シミュレーションで用いる。この場合、図 1 に示すように結晶塑性解析で用いる有限要素と Phase-field 解析で用いる規則格子のサイズが異なるため、データのマッピングを行う。三角形の有限要素の場合、要素内の結晶方位および転位密度は一定であるため、要素内にある規則格子の値はその要素の値で全て一定とする。結晶方位差は、規則格子の隣合う 4 点間の最大方位差として決定する。また転位密度から粒成長の駆動力となる蓄積エネルギーを算出するが、Phase-field 法は連続的な秩序変数を用いるため、駆動力も連続的に分布させる必要がある。そこで、平滑化法を用いて要素毎にステップ状に分布する蓄積エネルギーを滑らかに分布させる。ここで算出される結晶方位差と転位密度より核生成サイトを決定し、蓄積エネルギーを駆動力とする再結晶粒の生成・成長 Phase-field シミュレーションを行う。

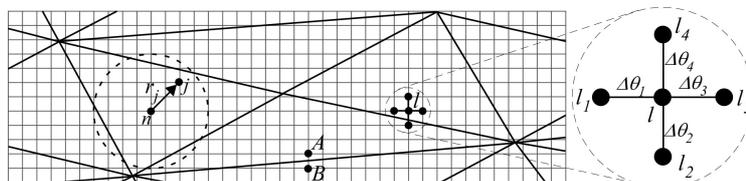


Fig. 1 Triangle elements for crystal plasticity FE simulation and regular grids for phase-field simulation.

3. シミュレーション結果

図 2 に解析例を示す。77 個の六角形定型粒を有する多結晶材を 50%の厚さまで平面ひずみ下で圧縮変形させた際の、(a) 結晶方位差、(b) 平滑化された蓄積エネルギー、それらに基づき決定した (c) 核生成サイト、そして Phase-field シミュレーションの結果より得られる (d) 再結晶組織である。詳細は発表当日に報告する。

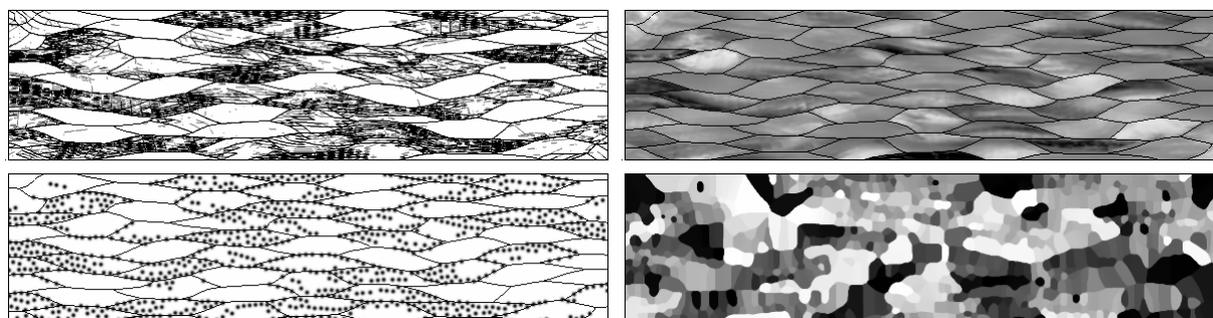


Fig. 2 (a) Misorientation after deformation, (b) Smoothed stored energy, (c) Nucleation site of recrystallized grain, and (d) Recrystallization microstructure. Solid line indicates original grain boundary.