

動的再結晶過程の Phase-Field モデリング

Phase-Field Modeling during Dynamic Recrystallization

正 高木 知弘 (神戸大・海科)

正 富田 佳宏 (神戸大・工)

Tomohiro TAKAKI, Faculty of Maritime Sciences, Kobe University, 5-1-1, Fukaeminami, Higashinada, Kobe
Yoshihiro TOMITA, Faculty of Engineering, Kobe University, 1-1, Rokkodai, Nada, Kobe

1 緒 言

積層欠陥エネルギーの比較的低い金属材料を、高温環境下で塑性変形させると動的再結晶が生じる。この力学的挙動は、温度とひずみ速度によって変化する微視組織の発展に強く影響されることが知られている。本研究では、動的再結晶過程の組織発展を再現することの可能な Phase-field モデルを構築する。ここで、転位密度と流れ応力の発展を理論式より、微視組織発展を Phase-field 法により評価する。

2 Phase-Field モデル

塑性変形中の転位密度 ρ とひずみ ε の関係は次式により表すことができる。

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho \quad (1)$$

ここで、 k_1 は加工硬化を表す定数、 k_2 は転位の回復を表す軟化係数である。流れ応力は次式により転位密度と関係付けることができる。

$$\sigma = \alpha\mu b\sqrt{\rho} \quad (2)$$

ここで、 α は 0.5 程度の相互作用係数、 μ はせん断弾性係数、 b はパーガースベクトルの大きさである。式 (1) と式 (2) より、転位密度の変化にともなう、応力とひずみの関係が決定される。

再結晶粒の核生成は、粒界上にパルジング機構により起こるとし、転位密度が次式から算出される臨界値に達したときに生じると仮定する。

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma\dot{\varepsilon}}{3bLM\tau^2} \right)^{1/3} \quad (3)$$

ここで、 γ は粒界エネルギー、 $\dot{\varepsilon}$ はひずみ速度、 L は転位の平均運動距離、 M は粒界モビリティ、 τ は転位線エネルギーである。転位密度が式 (3) の臨界値に達すると、初期転位密度を有する再結晶粒を生成させ、粒間の転位密度差に依存する蓄積エネルギー ΔE_{ij} を駆動力とする次式による粒成長シミュレーションを行う。

$$\dot{\phi}_i = - \sum_{j=1}^n \frac{M_{ij}^\phi}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ \begin{array}{l} (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k \\ + \frac{1}{2} (\alpha_{ik}^2 - \alpha_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \end{array} \right\} - \frac{\delta}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (4)$$

ここで、 ϕ_i は i 番の方位を有する結晶粒を表す phase field、 n は局所的に存在する phase field の数、 M_{ij}^ϕ 、 α_{ij} 、 W_{ij} は界面エネルギー、界面幅、粒界モビリティによって表される係数である。

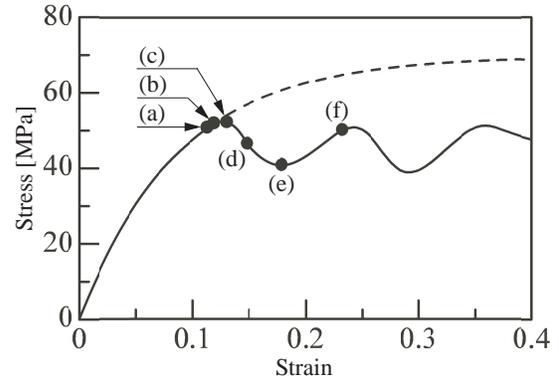


Fig. 1 Stress-strain curves

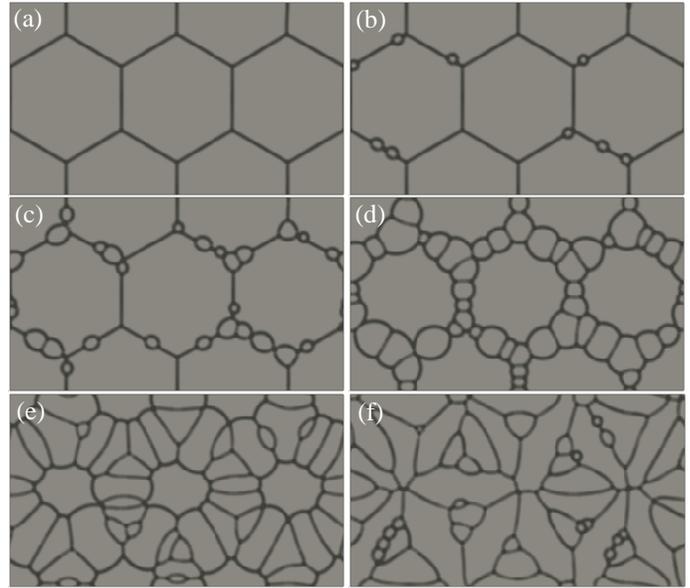


Fig. 2 Time evolutions of microstructure

3 シミュレーション結果

図 1 は、OFHC 銅を対象とし、 $\dot{\varepsilon} = 0.002 \text{ s}^{-1}$ 、 $T = 775 \text{ K}$ の条件下のシミュレーションで得られた応力 - ひずみ関係である。点線は、Phase-field シミュレーションを行わず、式 (1) と式 (2) から算出した結果である。また、図 2 は図 1 の各点に対応する微視組織の発展を示している。初期結晶粒は正六角形とし、平均粒径を $79.4 \mu\text{m}$ としている。図 1 中、点 (a) から再結晶粒の核生成が始まり、転位密度の低い再結晶粒の成長により点 (c) から軟化が生じている。塑性変形の継続により、再結晶粒内の転位密度が式 (1) によって増加し、点 (e) から再び硬化が生じ、点 (f) あたりから再度新たな再結晶粒の生成が生じていることが分かる。このように、再結晶粒の連続的な生成・成長により、応力 - ひずみ関係の揺らぎを再現できていることが確認できる。