

# 結晶塑性理論を用いた再結晶組織形成の Phase-field シミュレーション

## Phase-field simulation during recrystallization process coupled with crystal plasticity theory

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

### 1 緒 言

塑性変形した金属材料を焼なます際に生じる再結晶組織形成過程は、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>。そのため、再結晶組織を精度良く予測・制御するためには、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必要がある。本研究では、結晶塑性理論を用いて多結晶体の変形特性を評価し、そこで得られた情報に基づき、Phase-field 法による静的再結晶シミュレーションを行い、変形組織と再結晶組織の関係を評価する。

### 2 シミュレーションモデル

まずははじめに、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。図 1 に(a)23 結晶粒と(b)77 結晶粒モデルにおいて、公称ひずみ 0.5 まで圧縮変形させた時の結晶方位の分布を示す。

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。 $\phi$  と  $\theta$  の時間発展方程式は次のようになる。

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

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

ここで、 $M_\phi$  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、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 再結晶組織形成シミュレーション

図 1 の全領域を解析対象として再結晶 Phase-field 解析を行う。核生成条件は、(1) 結晶方位差 15° 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 4μm 以上の全条件を満足する格子点とする。また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) モデルを用いる。図 2,3 にそれぞれ 23,77 結晶粒を焼きなました際の、再結晶組織形成過程と再結晶後の結晶方位を示す。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。図 2,3 の再結晶組織を比較すると、77 結晶粒を焼きなました際に、より均等かつ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り、本モデルが塑性変形を反映した再結晶シミュレーションを可能とし

ていることが言える。なお、再結晶カイネティクスの評価など詳細は発表当日に行う。

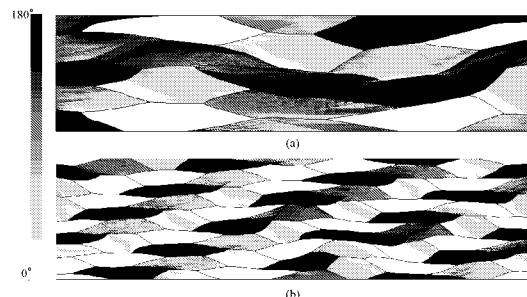


Fig. 1 Crystallographic orientation at 50% compression of (a) 23 grains and (b) 77 grains.



Fig. 2 Recrystallization microstructure evolutions when annealing 23 grains for (a) 100, (b) 1000[s] and (c) crystal orientation after recrystallization.

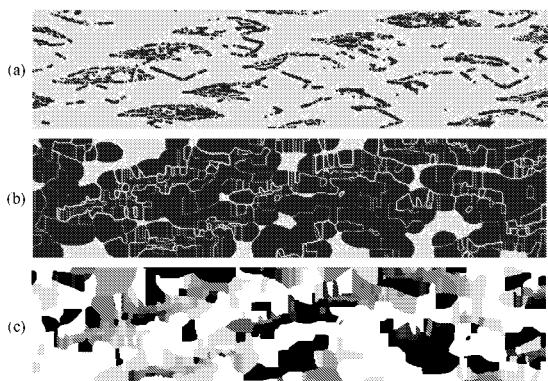


Fig. 3 Recrystallization microstructure evolutions when annealing 77 grains for (a) 100, (b) 1000[s] and (c) crystal orientation after recrystallization of annealing 77 grains.

### 参考文献

- (1) Humphreys, F.J. et al., Recrystallization and Related Annealing Phenomena, (1994), Elsevier Ltd.
- (2) 比嘉ら, 機論, A69, (2003), 523–529.
- (3) Warren, J.A. et al., Acta Mat., 51, (2003), 6035–6058.