Phase-field 法による結晶粒成長シミュレーション

神戸大学　○高木知弘　長谷部忠司　冨田佳宏

Grain Growth Phase-Field Simulation

Tomohiro TAKAKI, Tadashi HASEBE and Yoshihiro TOMITA

1　緒　　言

塑性変形を受けた金属材料は，結晶内部に転位などの欠陥を多く導入し，内部エネルギーの高い不安定な状態になる．この結晶を加熱すると，蓄積されたひずみエネルギーを駆動力とし，転位をほとんど含まない再結晶粒が成長する．このような結晶内部の組織変化を把握，制御することは工業的に極めて重要である．本研究では，多結晶体の静的再結晶過程を再現することのできる数値モデルおよび解析手順を提案する．ここで，多結晶体の変形応答は結晶塑性理論 [1]，再結晶粒の成長過程は Phase-field 法を用いて評価を行う．

2　解 析 モ デ ル

2.1　結晶塑性理論　再結晶粒の駆動力となるひずみエネルギーは，文献[1]で報告されたひずみ勾配結晶塑性理論を用いて算出する．ここで，次に示すひずみ速度依存性の有限変形を考慮した単結晶の構成式を用いる．

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = D^{e}_{ijkl} d_{kl} - \sum_{(a)} R^{(a)}_{ij} \dot{\gamma}^{(a)} \tag{1}$$

$$R^{(a)}_{ij} = D^{e}_{ijkl} P^{(a)}_{kl} + W^{(a)}_{im}\sigma_{mj} - \sigma_{im}W^{(a)}_{mj} \tag{2}$$

ここで，$\overset{\nabla}{S}_{ij}$ は Kirchhoff 応力の Jaumann 速度，D^{e}_{ijkl} は弾性係数テンソル，d_{ij} は変形速度テンソル，$P^{(a)}{}_{ij}$ および $W^{(a)}{}_{ij}$ はそれぞれ Schmid テンソルの対称および反対称成分，σ_{ij} は Cauchy の応力テンソル，$\dot{\gamma}^{(a)}$ はせん断ひずみ速度テンソル, 指数(a)は複数個あるすべり方向の(a)番目のものを表わす．せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ としては，次の指数則を用いる．

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{a}^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{(1/m)-1} \tag{3}$$

ここで，$\dot{a}^{(a)}$，$\tau^{(a)}$，$g^{(a)}$ は，それぞれすべり系(a)における基準せん断ひずみ速度，臨界分解せん断応力，基準分解せん断応力であり，m はひずみ速度感度指数である．基準分解せん断応力 $g^{(a)}$ は次式を用いている．

$$g^{(a)} = g^{(a)}_{0} + \sum_{(b)} a_{ab} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho^{(b)}_{a}} \tag{4}$$

ここで, $g_0{}^{(a)}$ と $\rho_a{}^{(a)}$ はそれぞれすべり系(a)における初期臨界分解せん断応力および蓄積転位密度, a_{ab} はすべり系の転位運動に関する相互作用マトリックス，a，μ および $\tilde{b}$ はそれぞれ，定数，せん断弾性定数，転位のバーガースベクトルの大きさである．蓄積転位密度 $\rho_a{}^{(a)}$ は SS 転位密度とひずみ勾配に随伴する GN 転位密度の和として表わしている．式(4)の時間微分をとることにより，基準分解せん断応力増分 $\dot{g}^{(a)}$ とせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ との関係を次のように表わすことができる．

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{(b)} h_{ab} \left| \dot{\gamma}^{(a)} \right| \tag{5}$$

式(5)中，h_{ab} はひずみ硬化マトリクスであり，SS 転位密度の発展式より求めることができる．

2.2　Phase-field 法　Warren，Kobayashi ら [2]によって提案された多結晶凝固の Phase-field モデルを，塑性変形により蓄積されたひずみエネルギーを駆動力とする再結晶粒の成長問題へ適用する．変形母相と再結晶粒により構成される系の自由エネルギーとして，次式で表わされる自由エネルギー汎関数を採用する．

$$F = \int \left[f(\phi) + \frac{\alpha^2}{2} |\nabla\phi|^2 + g(\phi) s |\nabla\theta| + h(\phi) \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\theta|^2 \right] dV \tag{6}$$

ここで，ϕ は母相中で零，再結晶粒内で 1 の値を取る phase field，θ は再結晶粒の結晶方位である．α，s，ε は正の定数，$g(\phi)$ と $h(\phi)$ は母相中で再結晶粒方位の影響を消去できるように $g(\phi)=h(\phi)=\phi^2$ を用いている．また，式(6)中の $f(\phi)$ は次式で表わされるポテンシャルを採用する．

$$f(\phi) = (1 - p(\phi)) f_{mo}\left(\varepsilon^{p}_{ij}\right) + p(\phi) f_{re}\left(\varepsilon^{p}_{ij}\right) + Wq(\phi) \tag{6}$$

ここで，$f_{mo}(\varepsilon^{p}{}_{ij})$ と $f_{re}(\varepsilon^{p}{}_{ij})$ はそれぞれ変形母相と再結晶粒内の蓄積エネルギー，W はエネルギー障壁，$q(\phi)$ はダブルウェルポテンシャル $q(\phi)=\phi^2(1-\phi)^2$，$p(\phi)$ は $p(0)=0$，$p(1)=1$，$p'(0)=p'(1)=0$ を満足する $p(\phi)=\phi^3(10-15\phi+6\phi^2)$ を採用する．再結晶粒内の転位密度は変形母相内の転位密度に比べて非常に小さいことが知られているため，本シミュレーションでは $f_{re}(\varepsilon^{p}{}_{ij})=0$ とし, 母相内の蓄積エネルギーは次の塑性仕事を用いている．

$$f_{mo}\left(\varepsilon^{p}_{ij}\right) = \int \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}^{p}_{ij} dt \tag{7}$$

Phase fiel ϕ と結晶方位 θ の時間発展方性式は次のようになる．

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M_{\phi}(\phi, \nabla\theta, T) \left[\alpha^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f(\phi)}{\partial\phi} - 2\phi s |\nabla\theta| - 2\phi \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\theta|^2 \right] \tag{8}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = M_{\theta}(\phi, \nabla\theta, T) \frac{1}{\phi^2} \nabla \cdot \left[\phi^2 \varepsilon^2 \nabla\theta + \phi^2 s \frac{\nabla\theta}{|\nabla\theta|} \right] \tag{9}$$

ここで，M_ϕ と M_θ は易動度であり，ϕ，$\nabla\theta$，温度 T の関数である. 本シミュレーションでは，$M_{\phi}(\phi, \nabla\theta, T) = M_{\phi}$，$M_{\theta}(\phi, \nabla\theta, T) = (1-\phi^2) M_{\theta}$ としている．M_ϕ と M_θ は定数，

$(1-\phi^2)$は結晶方位の回転を拘束するために導入している．次節で示すシミュレーション結果では，$\alpha = \sqrt{3\delta\sigma/b}$，$W = 6\sigma b/\delta$，$\varepsilon = \alpha/1000$，$s = 10\varepsilon$，$M_\phi = M_\theta$ としている．ここで，界面エネルギーσ = 10 J/m^2，界面幅δ = 1 μm，定数 b = 2.2 を仮定している．

3　解 析 手 順 と 結 果

再結晶粒の駆動力となる塑性仕事を結晶塑性解析により算出する．図 1 に示すように，平面ひずみ状態下で圧縮変形を受ける 2 すべり系 FCC 多結晶体を解析対象とする．ランダムに結晶方位を与えた 77 結晶粒モデルを用い，全領域は Crossed-Triangles 要素 64×64 で分割を行っている．解析対象となる正方領域の 1 辺は L = 0.183mm としている．変位速度 $\dot{u}/L$ = -10^{-3} 1/s で公称ひずみ u/L =- 0.3 まで圧縮変形を与えている．図 2 に u/L =-0.3 時点における変形状態と塑性仕事の分布を示す．

次に，結晶粒成長 Phase-field シミュレーションを行う．図 2 内の白線で囲った長方形領域(0.128×0.080mm)を解析対象とする．Phase-field シミュレーションでは，アダプティブ有限要素法を採用し，シミュレーションの効率化を図っている [3, 4]．レベル 0~5 の 6 段階の要素サイズを使用し，解析領域をレベル 0 の最大要素で 16×10 分割している．この場合，レベル 5 の最小要素では 512×320 分割となり，レベル 5 の要素サイズは 1 辺 dx = 0.25 μm である．図 3(a)は Phase-field 解析領域内の塑性仕事分布と再結晶粒核の位置（白丸）を示している．初期核は，塑性仕事の節点値の高い方から，各結晶粒核間隔が 7.5 [μm]以上となるように 20 個と仮定している．なお，駆動力の影響を強調するため，塑性仕事が 100 MJ/m^3 以下の領域を強制的に零としている．　図 3(b)は初期要素

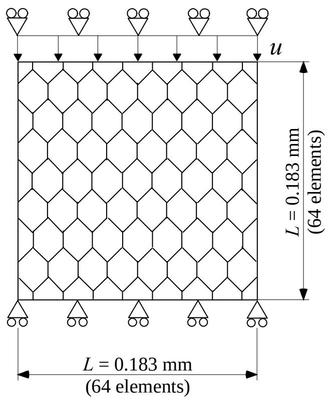

Fig.1 Computational model for crystal plasticity simulation.

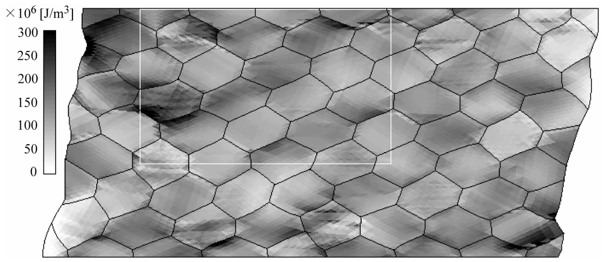

Fig.2 Deformation pattern and plastic work distribution.

分割を示している．黒い実線内が再結晶粒を表わしている．各再結晶核には 0~3 の結晶方位をランダムに与えている．図 4 は，無次元化時間 $t / (dx^2/M_\phi\alpha^2)$ = (a) 8.7, (b) 17.5, (c) 26.2,　(d) 35.0 における母相と再結晶粒の界面および要素分割図を示している．時間の経過と伴に，結晶方位の異なる再結晶粒が衝突し再結晶粒の結晶粒界が形成されている．また，再結晶粒は図 3(a)の白い領域で示される塑性仕事が零の領域を避けるように成長していることが分かる．

より詳細な結果および考察は講演会当日に発表する．

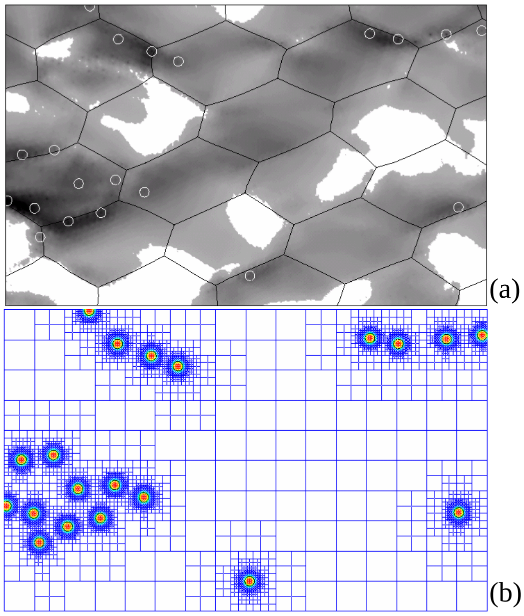

Fig.3 Plastic work distribution and initial adaptive elements.

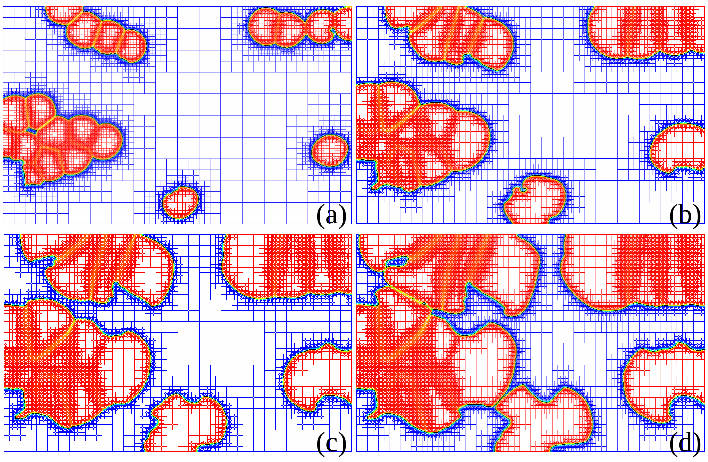

Fig.4 Time evolution of interface and adaptive elements.

参 考 文 献

1) 比嘉吉一，澤田幸秀，冨田佳宏，機論，**A69**, 523(2003).
2) J. A. Warren, R. Kobayashi, A. E. Lobkovsky and W. C. Carter，Acta Mat.，**51**，6035(2003).
3) T. Takaki, T. Fukuoka and Y. Tomita, Proc. CD-ROM WCCM VI, (2004).
4) 高木知弘，冨田佳宏，機会学会関西支部第 80 期定時総会講演会講演論文集, No.054-1, 5-21(2005).