

ひずみ勾配結晶塑性論に基づく再結晶粒の生成と成長シミュレーション

神戸大学[海科] 高木知弘 神戸大学[院] 山中晃徳
 沖縄高専[機械] 比嘉吉一 神戸大学[工] 富田佳宏

Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grain based on Strain Gradient Crystal Plasticity Theory

Tomohiro TAKAKI, Akinori YAMANAKA, Yoshikazu HIGA and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

静的再結晶は、冷間塑性加工により材料内部に蓄積された欠陥を除去し、材質を向上させる目的で行われる。その際に形成される微視組織は、材料の力学的性質に強く影響を及ぼす。この微視組織は、再結晶時の温度や時間に依存するが、再結晶開始時の変形組織の影響が最も強いと言われている¹⁾。そのため、再結晶完了時に形成される材料組織を適切に制御するためには、塑性変形過程と再結晶過程を連続して評価することの可能な数値モデルおよび解析手順の構築が重要である。

本研究では、静的再結晶過程を再現することの可能な解析手順を構築する。ここで、材料の塑性変形挙動は、多結晶材の粒サイズ依存性を考慮することのできる、ひずみ勾配結晶塑性理論²⁾に基づいた有限要素シミュレーションにより評価する。この結果得られる転位密度と結晶方位を再結晶シミュレーションの核生成情報と駆動力として用いる。再結晶シミュレーションは Phase-field 法を用いて行う^{3,4)}。

2 解析手順と結果

本研究で提案する再結晶組織評価の解析手順は、次の3ステップから構成されている。

1. ひずみ勾配結晶塑性理論に基づく有限要素シミュレーションにより、多結晶金属材料の変形組織の評価を行う。
2. 1の結果得られた転位密度 ρ と結晶方位 θ を、再結晶 Phase-field シミュレーションの格子点にマッピングする。ついで、各格子点の転位密度から蓄積エネルギーを算出し平滑化する。
3. 再結晶粒の生成および成長過程の Phase-field シミュレーションを行う。

図1は結晶塑性有限要素シミュレーションで用いる解析モデル、境界条件および初期結晶方位を示している。204.8 × 204.8 μm の正方領域を64 × 64のcrossed triangles要素で分割し、77個の定型粒モデルを配置している。解析は、2すべり系平面ひずみ問題として純アルミ材を想定して行う。解析領域上下端をshear freeとし、上端面にひずみ速度 -10^{-3} [s]を与え、下端面の変位を拘束する。図2は45%圧縮した際の変形状態を示している。図中のグレーで示した長方形領域(352 × 112.64 μm)は再結晶 Phase-field シミュレーションの対象領域であり、800 × 256の規則格子に分割する。図3(a)と(b)は、結晶塑性シミュレーションの結果をPhase-fieldシミュレーションの規則格子にマッピングした結晶方位 θ と転位密度 ρ の分

布である。これらの図より、粒内で方位の分布が生じている領域において高い転位密度となっていることが確認できる。また、図3(c)は(b)の転位密度 ρ から計算した

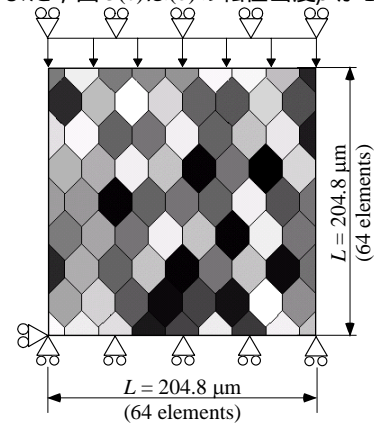


Fig. 1 Computational model and boundary conditions for crystal plasticity finite element simulation

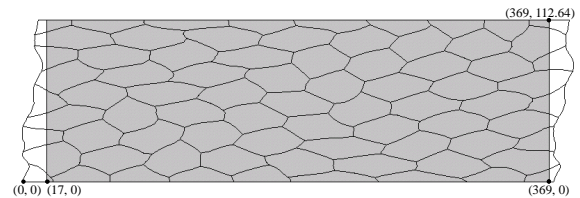
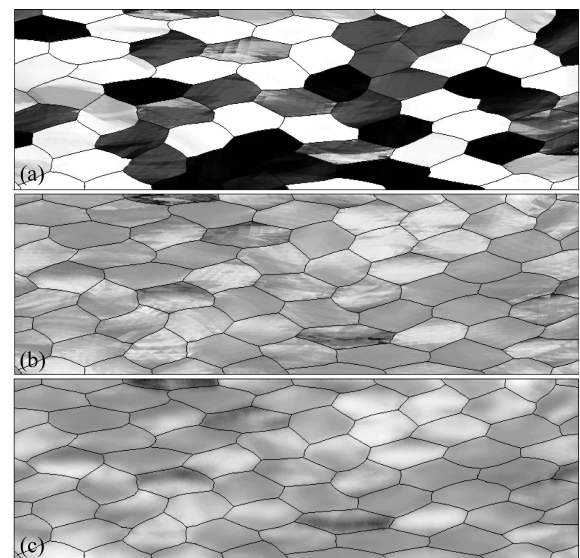


Fig. 2 Deformation pattern at 45% compression



(a) θ	0.	π [rad]
(b) ρ	0.304	1.510×10^{15} [1/m ²]
(c) E_{store}	0.387	1.483 [MPa]

Fig. 3 Distributions of (a) crystallographic orientation, (b) dislocation density, and (c) stored energy

蓄積エネルギー $E = 0.5\rho ub^2$ を Winslow の平滑化法⁵⁾を用いて平滑化した E_{store} の分布を示している。図 3(b)と(c)より、分布傾向を変えずに蓄積エネルギーを滑らかに分布できていることが確認できる。

図 3 に示すデータに基づき、再結晶 Phase-field シミュレーションを行う。本モデルでは、2つの秩序変数 phase field ϕ と結晶方位 θ を用いている。Phase field ϕ は再結晶粒内で 1、変形母相内で 0 の値をとる。これらの時間発展方程式は次式ようになる。

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

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

再結晶粒の核生成モデルとして、site saturated nucleation モデルと constant nucleation rate モデルの2つのモデルを採用する¹⁾。図 4 は図 3(a)の結果に基づき算出された、結晶方位差の分布を示している。核生成には高角粒界が必要であると言われているため、結晶方位差が 15° 以上の格子を核生成の可能なサイトとする¹⁾。site saturated nucleation モデルでは、各格子点の転位密度が最大値の 50% (s1), 60% (s2), 70% (s3) 以上の格子点に解析初期段階で核を配置する。constant nucleation rate モデルでは、核生成速度 \dot{N} (1-X) に対応して時間と共に核を増加させる。ここで、X は再結晶面積分率、 \dot{N} [1/s] は核生成速度であり、 $\dot{N} = 1/10$ (c1), $1/100$ (c2), $1/250$ (c3), $1/1000$ (c4) を用いる。

図 5 は constant nucleation rate モデル $\dot{N} = 1/100$ [1/s] における再結晶粒の成長過程を、phase field ϕ の分布として示している。図 3 と図 4 と見比べると、高い転位密度と結晶方位差を有する領域から再結晶核が生成し、成長する過程で再結晶粒同士が衝突し新しい結晶粒界を形成していることが分かる。図 6 は図 5 の最終的な再結晶微視組織を方位分布として示している。早い段階で核生成が生じる変形時の結晶方位差の大きな領域において、縦方向に細長い再結晶粒が観察される。図 7 は各核生成モデルの再結晶面積分率 X の時間変化を示している。Constant nucleation rate モデルでは典型的な S 字曲線が観察されるが、site saturated nucleation では $t = 0$ において既に $X > 0$ となり、S 字曲線を示さないことが分かる。また、 $\ln(t) + \ln\{\ln(1/(1-X))\}$ の関係を表わした JMAK プロットの勾配である avrami 指数 k は、それぞれ 1.05(s1), 1.23(s2), 1.36(s3), 1.67(c1), 2.17(c2), 2.28(c3), 2.34(c4) となり、site saturated nucleation モデルと constant nucleation rate モデルの理論値、それぞれ 2 と 3 より小さい値を示した。

参考文献

- 1) Humphreys, F. J. and Hatherly, M., Recrystallization and Related Annealing Phenomena, (2004) Elsevier.
- 2) 比嘉ら, 機論 A, 69, 523(2003).
- 3) J. A. Warren, et al., Acta Materialia, 51, 6035(2003).
- 4) T. Takaki, et al., J. Crystal Growth, 287, 495(2006).
- 5) 手塚, 土田, アダプティブ有限要素法, 197, (2003) 日本計算工学会.

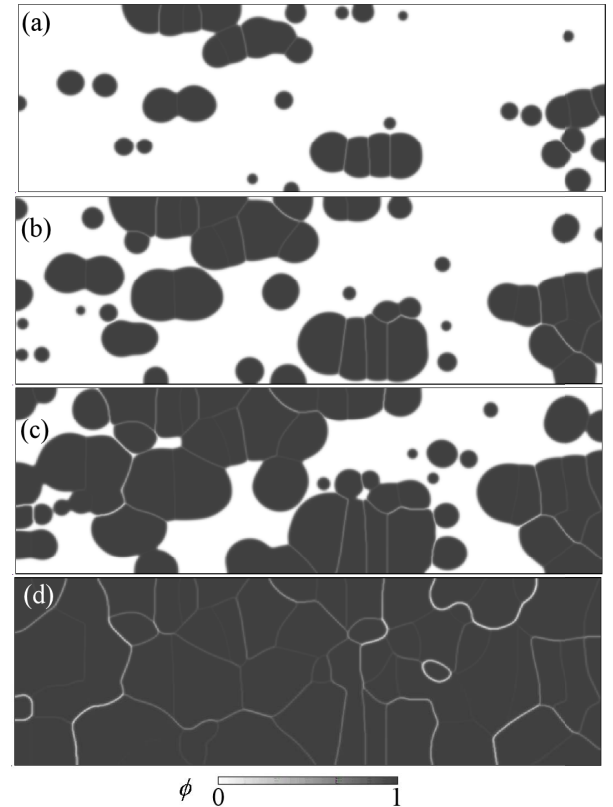
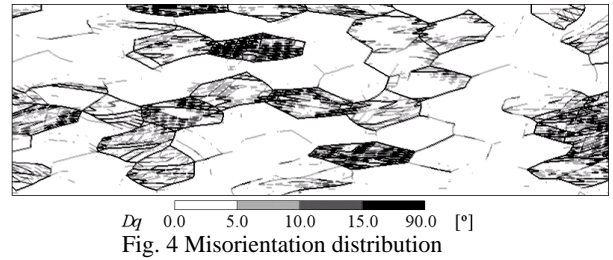


Fig. 5 Temporal evolution of microstructure during recrystallization: $t =$ (a) 400, (b) 600, (c) 800, and (d) 1700 [s]

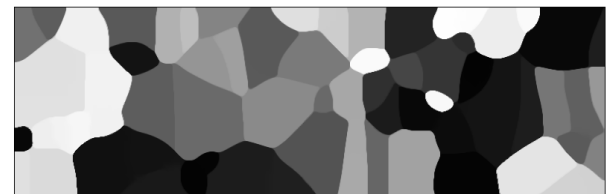


Fig. 6 Recrystallization microstructure for c2 model

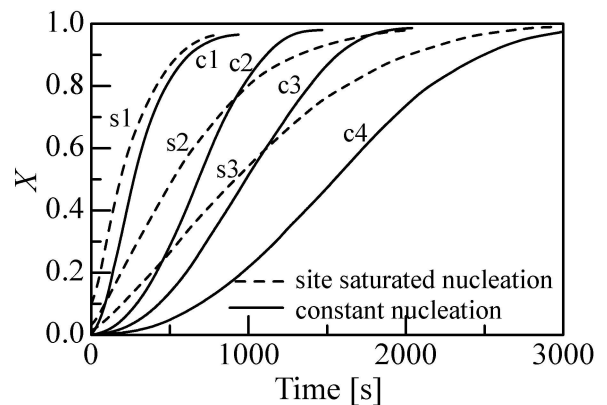


Fig. 7 Recrystallization area flux, X, vs time