

ナノ結晶材料変形過程の Phase Field Crystalシミュレーション

神戸大学 [院] 廣内 智之

京都工芸繊維大学 [院] 高木 知弘
神戸大学 [院] 富田 佳宏

Phase Field Crystal Simulation during Deformation of Nanocrystalline Material
Tomoyuki HIROUCHI, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

実際の材料の物理化学的な特性は、材料の微視組織内に存在する欠陥に強く影響されることが知られている。そのため、材料の更なる高機能化および新機能の発現のためには、材料の微視組織に依存する巨視的な材料特性評価を可能とする数理モデルの構築が必要不可欠である。最近, Elder らによって, 原子レベルの格子間隔に対応しながら, 拡散時間スケールでの物理現象を表現可能とする Phase Field Crystal(PFC) 法⁽¹⁾が提案された。一般的に, 金属材料の塑性変形は, 材料の体積が一定の状態で行進するが, これまでの PFC 法を用いた多結晶体の変形シミュレーション⁽¹⁾⁽²⁾では, 境界条件の設定が困難とされ, 体積一定条件下での塑性変形を再現できていない。

そこで, 本研究では, 新たな変形シミュレーション手法を提案し, それを用いて, ナノ結晶体の変形シミュレーションを行い, 新たな手法の有用性および妥当性を検討する。提案した手法は, 差分格子の大きさを制御することにより, 体積一定の塑性変形を再現可能としているところに特徴を有する。

2 Phase Field Crystal 法

2.1 秩序変数と支配方程式 PFC 法は, 単結晶中の原子配列のような周期状態を表現するために, 秩序変数が周期的な値をとることが大きな特徴であり, 従来の Phase field 法と大きく異なる点である。本手法にて用いる秩序変数 ϕ は, 時間平均化された原子の数密度と定義され, 保存場である。固相領域においては原子の周期構造を表現するため, ϕ は周期的な値をとる。また, ϕ の最大点を原子の位置とする。液相領域においては原子のランダムな配置を時間的に平均化して一定値 ϕ_0 としている。

ここで, この秩序変数を用いた結晶の周期構造を表す最も基本的な自由エネルギー汎関数を以下に示す。

$$F = \int dV \left[\frac{\phi}{2} \{ \alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2 \} \phi + \frac{u}{4} \phi^4 \right] \quad (1)$$

秩序変数を保存場とするため, ϕ の時間発展方程式は次式のように表せる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \{ \{ \alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2 \} \phi + u \phi^3 \} \quad (2)$$

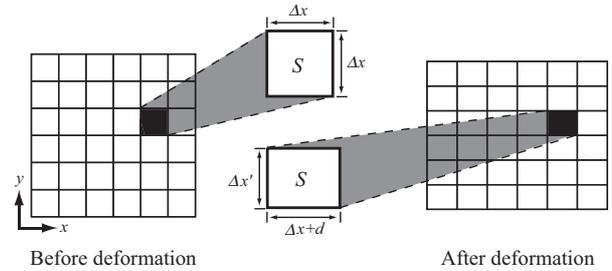


Fig. 1: The technique of tensile deformation controlling sizes of difference lattices.

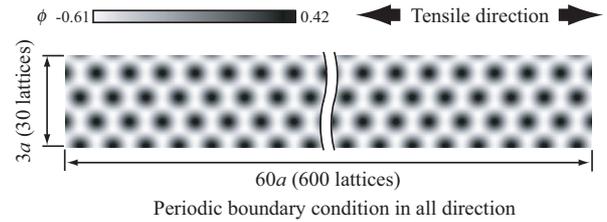


Fig. 2. Phase field profile at the initial condition.

ここで, $\alpha \Delta T$ は駆動力, u, λ, q_0 は平衡状態時の物質に依存するパラメータ, Γ は ϕ のモビリティである。

2.2 差分格子の制御 変形解析における差分格子の制御法を模式的に図 1 に示す。各時間ステップ Δt 毎に差分格子の x 軸方向の長さを d ($d = \epsilon \Delta x \Delta t$) だけ増加させ, 常に差分格子の面積が一定となるように y 軸方向の長さを $\Delta x'$ ($\Delta x' = (\Delta x)^2 / (\Delta x + d)$) としている。ここで, ϵ は無次元ひずみ速度である。また, 数値解析上では, 各時間ステップ毎に変化させた差分格子幅を, 式 (2) を差分法にて離散化した際に現れる差分格子幅に代入して解析を行う。

3 単結晶体の変形シミュレーション

本章では, 提案した手法を用いて単結晶体の変形シミュレーションを行い, 弾性変形挙動を評価する。

3.1 解析モデル 図 2 に phase field の初期状態を示す。原子間距離を a とし, $60a \times 3a$ の解析領域を 600×30 の差分格子にて分割する。解析領域の縦横比の関係上, 図 2 は中央部分で省略している。変形前後の

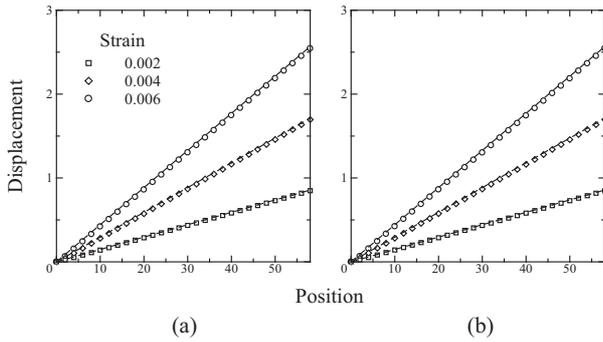


Fig. 3: Atomic displacement distributions at strain rate with (a) 5.17×10^{-5} and (b) 5.17×10^{-6} .

原子の位置を容易に比較できるように、変形方向に対して平行に原子を配置する。無次元ひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ を $\dot{\epsilon} = 5.17 \times 10^{-5}$ と $\dot{\epsilon} = 5.17 \times 10^{-6}$ について解析を行う。実際のひずみ速度では、およそ $10^1/s \sim 10^2/s$ に相当する。また、各種パラメータを、 $(\alpha\Delta T, \phi_0, u, \lambda, q_0, \Gamma, \Delta t) = (-0.25, -0.285, 1, 1, 1, 3.2 \times 10^{-3})$ とする。

3.2 解析結果 図3に各変形量における原子の変位分布を示す。また、点線で各変形量に対する解析的な線形変位分布を表示する。これらから、どちらの変形速度領域においても、線形分布に一致した原子の変位分布を確認できる。これより、本手法を用いて、MDシミュレーションよりも現実的な時間スケールにおける変形速度下で、線形弾性応答を満たすような系の変形挙動となることを確認した。

4 二結晶体の変形シミュレーション

本章では、提案した手法を用いて二結晶体の変形シミュレーションを行い、塑性変形挙動を評価する。

4.1 解析モデル 図4に二結晶体の初期構造の自由エネルギー分布を示す。自由エネルギーで表示することにより、格子欠陥領域において高いエネルギーが示されるため、格子欠陥の位置を容易に把握できる。前章と同様の原子間距離 a を用い、 $60a \times 60a$ の解析領域を 600×600 の差分格子にて分割する。凝固シミュレーションにより各粒の方位が $\theta = 20^\circ, 40^\circ$ となるように初期構造を形成する。前章と同様の無次元ひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ を用いて、 $\dot{\epsilon} = 5.17 \times 10^{-6}$ とし、各種パラメータは前章と同じ値を用いる。

4.2 解析結果 図5に二結晶体の変形過程の自由エネルギー分布を示す。変形が進むと、図5(a)に示す初期構造で形成された粒界の凸部が尖り始める。これは、変形によって、二結晶体内の幾何学的な構造変化が生じ、粒界の形状を変化させていると考えられる。次に、粒界の先端部において応力集中が生じるため、粒界の先端部から転位が放出され(図5(b))、更に、図5(a)で示す粒界の位置から、連続的な転位の放出が

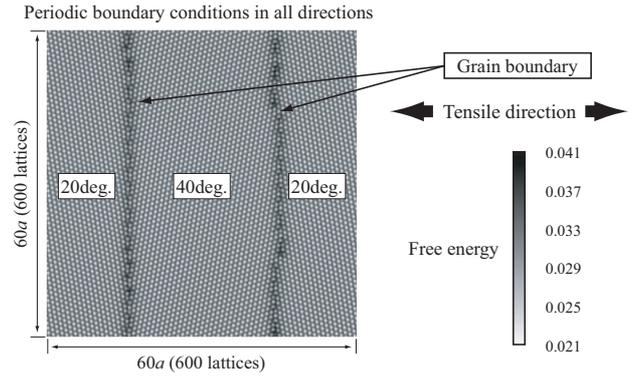


Fig. 4: The initial configurations of grain boundaries and atoms in the bicrystalline structure.

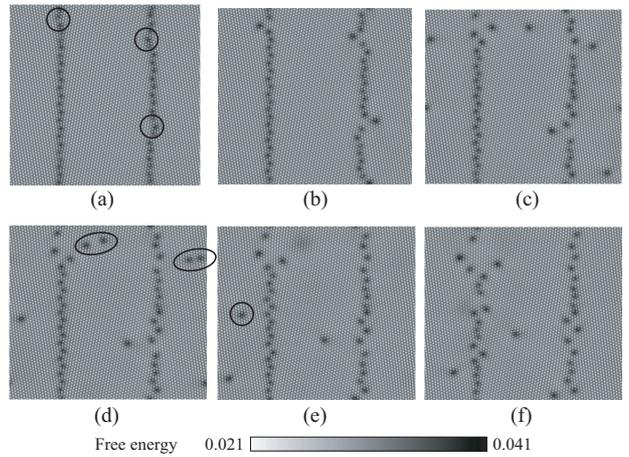


Fig. 5: Deformation behaviors of the bicrystal at the state with strain $\epsilon =$ (a) 0.020, (b) 0.045, (c) 0.057, (d) 0.060, (e) 0.063 and (f) 0.067.

観察できる(図5(c))。その後、転位が粒内を移動し、図5(d)で示す転位が互いに向かってくる転位と相互作用し、消滅することが確認できる(図5(e))。また、図5(e)で示す転位が粒界に吸収されることも分かる(図5(f))。このように、粒界の先端部から転位が放出されることや、粒界が転位の発生源および吸収源となることはMDシミュレーションで報告されている。⁽³⁾ これより、本手法を用いて、二結晶体の塑性変形挙動を再現できていると考えられる。

参考文献

- (1) K. R. Elder and M. Grant, Phys. Rev. E **70**, 051605 (2004).
- (2) T. Hirouchi et al, Proc. of Third APCOM (CD-ROM), MS31-6-3, 1-8., (2007).
- (3) L. Capolungo et al, J. Mech. Phys. Solids **55** 2300-2327 (2007).