

結晶塑性解析に基づくサブグレイン組織予測と再結晶シミュレーション

京都工芸繊維大学[院] ○高木知弘 神戸大学[院] 山中晃徳
神戸大学[院] 富田佳宏

Subgrain Structure Prediction from Crystal Plasticity Analysis and Recrystallization Simulation

Tomohiro TAKAKI, Akinori YAMANAKA and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

冷間加工後の熱処理過程で生じる再結晶組織を精度良く予測・制御することは、製品の諸特性を向上させるために極めて重要である¹⁾。このためには、試行錯誤的な実験的評価に加えて、コンピュータを援用する数値的評価が重要となる。しかしながら、再結晶組織は加工時の変形組織の影響を強く受けることから、精度良く予測された変形組織に基づく再結晶粒の核生成・成長シミュレーションが不可欠であり、このことがモデルの構築を困難にしている。

著者らはこれまでの研究で、結晶塑性有限要素解析から変形時の結晶方位と蓄積エネルギーを算出し、これに基づく再結晶核生成およびKWC Phase-fieldモデル²⁾により再結晶粒成長を再現する連成再結晶モデルを構築した³⁾。本手法はRaabeら⁴⁾と同様の手法であるが、再結晶シミュレーションで多く用いられているMonte Carlo法やCellular automaton法の代わりに、粒成長問題を精度良く解くことのできるPhase-field法を新たに導入した。しかしながら、これらの手法では核生成条件を仮定する必要があり、再結晶カイネティクスや最終的な再結晶組織は、設定する核生成条件に依存して変化し、定量的な評価が困難である。

核生成条件を前もって設定せず自発的な核生成を可能とする手法として、方位差に依存した粒界エネルギーと粒界モビリティを導入することで、サブグレイン構造の粒界エネルギー駆動粒成長、つまり異常粒成長を用いる方法がある⁵⁾。そこで本研究では、結晶塑性解析から得られる情報に基づき変形時のサブグレイン構造を予測し、そのサブグレイン構造を初期構造とするMulti-phase-field法⁶⁾による異常粒成長シミュレーションを行うことで、変形組織に基づく自発的な核生成を可能とする再結晶モデルを構築する。ここで、Multi-phase-field法の数値解法においてKimら⁷⁾のアルゴリズムを導入することで、多くの粒の成長を効率的にシミュレートすることを可能とする。

2 再結晶モデル

2.1 サブグレイン組織予測 EBSD法などによる組織観察から蓄積エネルギー E_{store} を算出する際、

$$E_{store} = \frac{K\gamma_s}{D_s} \quad (1)$$

が良く用いられる。ここで、 γ_s は粒界エネルギー、 D_s はサブグレイン直径、 K は定数である。式(1)にRead-Shockleyの関係

$$\gamma_s = \gamma_m \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \quad (2)$$

を考慮すると、

$$D_s = \frac{K}{E_{store}} \gamma_s = \frac{K}{E_{store}} \gamma_m \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \quad (3)$$

を得ることができる。蓄積エネルギー E_{store} は結晶塑性解析から算出される転位密度 ρ を用いて次式により計算することができる。

$$E_{store} = \frac{1}{2} \rho \mu b^2 \quad (4)$$

ここで、 μ はせん断弾性係数、 b はバーガースベクトルの大きさである。さらに、サブグレイン直径 D_s と結晶方位差 $\Delta\theta$ との関係として $\Delta\theta = |\nabla\theta|D_s$ を仮定すると、式(3)より、

$$\Delta\theta = \Delta\theta_m \exp \left[1 - \frac{1}{\left\{ |\nabla\theta| \frac{K}{E_{store}} \frac{\gamma_m}{\Delta\theta_m} \right\}} \right] \quad (5)$$

を得ることができる。ここで、 $|\nabla\theta|$ は局所的な結晶方位勾配である。

式(5)より、結晶塑性解析から導出される E_{store} と $|\nabla\theta|$ により局所的な方位差 $\Delta\theta$ を算出すると式(3)よりサブグレイン直径 D_s が得られる。これらの情報を元に、Phase-field法による通常粒成長シミュレーションを行うことで、サブグレイン構造を作成する。

2.2 Multi-phase-field法 粒成長シミュレーションには、Steinbachら⁸⁾のMulti-phase-fieldモデルを用いる。本モデルはパラメータと物性値の関係付けが容易で定量的な粒成長シミュレーションが可能であり、Kimら⁷⁾のアルゴリズムを用いることでシミュレーションを効率的に行うことができる。

文献[6]によると、粒 i 内で1、他粒内で0、粒界で $0 < \phi_i < 1$ の値をとるphase field ϕ_i の時間発展方程式は、次式で与えられる。

$$\dot{\phi}_i = - \sum_{j=1}^n \frac{M_{ij}^{\phi}}{n} \left[\sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} \right] \quad (6)$$

ここで、 n は $\phi_i > 0$ のphase fieldの数であり、勾配係数 a_{ij} 、エネルギー障壁 W_{ij} 、phase fieldモビリティ M_{ij}^{ϕ} は次式により粒界エネルギー γ_{ij} 、界面幅 δ 、粒界モビリティ M_{ij} と関係付けることができる。

$$a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}, \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{4\delta} M_{ij} \quad (7)$$

粒界エネルギーの方位差依存性は式(2)により、粒界モビリティの方位差依存性は次式により表される。

$$M_{ij}(\Delta\theta_{ij}) = M_m \left[1 - \exp \left\{ -5 \left(\frac{\Delta\theta_{ij}}{\Delta\theta_m} \right)^4 \right\} \right] \quad (8)$$

3 シミュレーション結果

図1は多結晶材料の結晶塑性解析結果から一部を取り出したものを示している。Grain 1は結晶方位差が小さく蓄積エネルギーは比較的高い粒，grain 2は方位差が小さく蓄積エネルギーも低い粒，grain 3は粒内部では蓄積エネルギーが低く粒界近傍で大きな方位差と蓄積エネルギーが生じている粒，grain 4は方位差は比較的小さいが蓄積エネルギーが高い粒である。これらの結果より2.1節の手順に基づき各差分格子点のサブグレインサイズ D_s と方位が決定される。これに基づき、サブグレイン組織を作成するための粒成長シミュレーションの核を配置したものが図2(a)である。また、この粒成長シミュレーションの結果得られたサブグレイン組織を図2(b)に示している。図1と図2を比較することにより、蓄積エネルギーの低いgrain 2とgrain 3の内部では粗いサブグレイン組織が、粒界では微細なサブグレインがそれぞれ生成していることが分かる。さらに、蓄積エネルギーの大きなgrain 1とgrain 2内部では細かなサブグレイン組織となっている。

図3は図2(b)を初期構造とする再結晶 Multi-phase field シミュレーションの結果を示している。図3(a)より、初期粒界に位置する方位差の大きなサブグレインが優先的に成長し再結晶核となり、より大きく成長していることが分かる。また、粒内においても方位差の比較的高

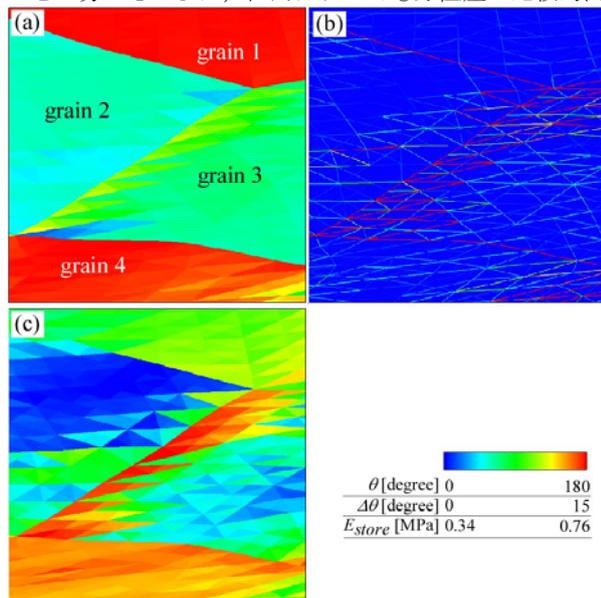


Fig.1 Results of crystal plasticity FE simulation. (a) Crystal orientation, (b) misorientation and (c) stored energy.

い粒界を有する粒が成長し、再結晶核を形成している。再結晶核の成長は、サブグレインサイズが小さく蓄積エネルギーの高いgrain 1とgrain 4へ向かって進んでおり、サブグレインサイズの大きなgrain 2とgrain 3の内部では比較的長い時間が経過した後も再結晶が生じていないことが分かる。

以上のように、本研究で提案した手法は自発的な再結晶核生成を伴う変形組織に依存した再結晶粒成長が可能であることが確認できる。

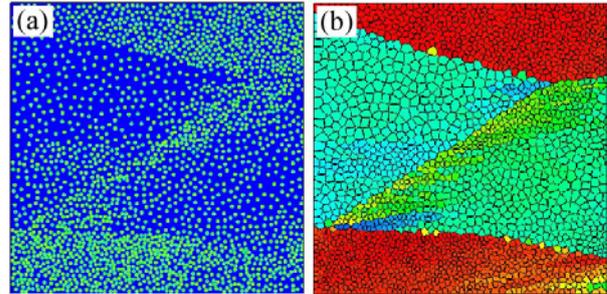


Fig.2 (a) Nuclei to create subgrain structure and (b) created subgrain structure.

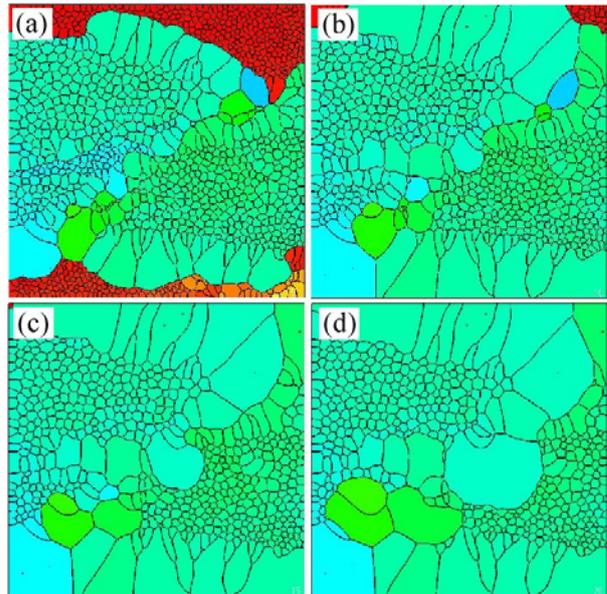


Fig.3 Microstructure evolutions during recrystallization.

参考文献

- 1) F.J. Humphreys and M. Hatherly, Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Elsevier, 2004.
- 2) R. Kobayashi, J. A. Warren and W. C. Carter, Physica D 119, 415 (1998).
- 3) 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏, 機論 A, 73, 482 (2007).
- 4) D. Raabe and R. C. Becker, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 8, 445 (2000).
- 5) F. J. Humphreys, Acta Mater., 45, 4231 (1997).
- 6) I. Steinbach and F. Pezzolla, Physica D, 134, 385 (1999).
- 7) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim and Y. B. Park, Phys. Rev. E, 74, 061605 (2006).