

Phase Field Crystal法による 材料変形シミュレーション手法の構築

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

Construction of Deformation Simulation Strategy of Material by Phase Field Crystal Method

Tomoyuki HIROUCHI, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA

1 緒 言

工業用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、拡散時間スケールで原子の挙動を解析可能とする Phase Field Crystal(PFC) 法⁽¹⁾ が提案された。一般的に、塑性変形過程における金属材料の体積は変化しないが、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する。次いで、それを用いて差分格子サイズの応力評価におよぼす影響を検討するため、一次元変形シミュレーションを行う。更に、二次元問題へ拡張し、ナノ結晶体の弾性変形挙動および塑性変形挙動を評価し、構築した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方法で、二次元問題では、体積一定の塑性変形を再現できるところに特徴を有する。

2 Phase Field Crystal 法

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 は周期的な値をとり、 ϕ の最大点を原子の位置とする。液相領域においては時間に依存するランダムな原子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式 (1) に、 ϕ を保存場とするので時間発展方程式は式 (2) に示す。

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

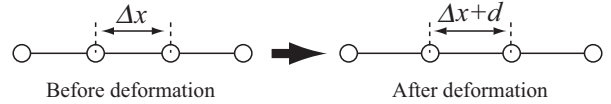


Fig. 1 The technique of tensile deformation in one dimension.

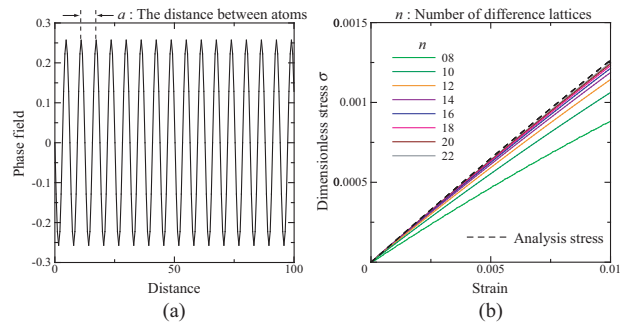


Fig. 2 (a) Phase field profile at the initial condition and (b) stress-strain curves.

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

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。

3 一次元変形シミュレーション

本章では、提案した手法を用いて一次元変形シミュレーションを行い、差分格子サイズの応力評価におよぼす影響を検討する。

3.1 差分格子の制御 図 1 に変形解析における差分格子の制御方法を模式的に示す。各時間ステップ Δt 毎に差分格子の x 軸方向の長さを $d = \dot{\epsilon} \Delta x \Delta t$ だけ増加させて、引張り変形を表現している。ここで、 $\dot{\epsilon}$ は無次元ひずみ速度である。

3.2 解析モデル 図 2(a) に phase field の初期分布を示す。原子間距離を a とし、 $16a$ の解析領域を用いる。差分格子間隔 Δx を $\Delta x = a/n$ とし、差分格子数 n を変化させて解析精度を評価する。無次元ひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ を $\dot{\epsilon} = 9.55 \times 10^{-6}$ とし、各種パラメータを、 $(\alpha \Delta T, \phi_0, u, \lambda, q_0, \Gamma) = (-0.05, 0, 1, 1, 1, 1)$ とする。

3.3 解析結果 図 2(b) に応力-ひずみ線図を示す。応力 σ は、前時間ステップと現ステップのひずみ

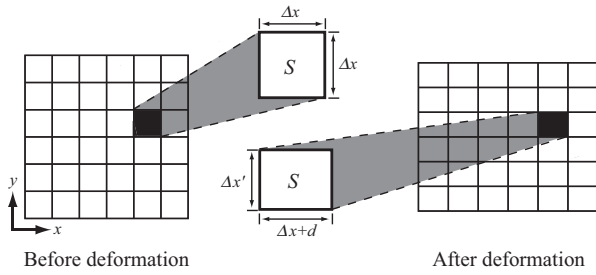


Fig. 3 The technique of tensile deformation in two dimensions.

みの変化量 $\Delta\varepsilon$ に対する自由エネルギーの変化量 ΔF の割合 $\sigma = \Delta F/\Delta\varepsilon$ により算出する. 図 2(b) の点線は, 解析解である. これより, n が大きくなるにつれて, 数値解が解析解に近づくことが確認できる. また, $n = 8, 10, 14, 22$ と変化させた時の誤差は 29, 15, 6, 1% 程度であり, 1% 程度の誤差で評価するためには, $n = 22$ 以上の差分格子数が必要であることが分かる. しかしながら, 一つの原子を表現するために 22 個の差分格子を用いると, 二次元, 三次元問題では計算容量が膨大となるため, 次章では $n = 10$ を用いる.

4 二次元変形シミュレーション

本章では, 単結晶および二結晶の二次元変形シミュレーションを行い, 弾性変形挙動および塑性変形挙動を評価する.

4.1 差分格子の制御 図 3 に差分格子の制御方法を模式的に示す. 各時間ステップ Δt 毎に差分格子の x 軸方向の長さを $d = \dot{\varepsilon}\Delta x\Delta t$ 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 $\Delta x' = (\Delta x)^2/(\Delta x + d)$ とし, 体積一定変形を表現することができる.

4.2 単結晶の変形シミュレーション 図 4 に ϕ の初期状態を示す. 変形前後の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し, 無次元ひずみ速度 $\dot{\varepsilon} = 5.17 \times 10^{-5}$ および 5.17×10^{-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, $(\alpha\Delta T, \phi_0, u, \lambda, q_0, \Gamma, \Delta t) = (-0.25, -0.285, 1, 1, 1, 1, 3.2 \times 10^{-3})$ とする.

図 5 に各変形量における原子の変位分布を示す. また, 点線で各変形量の解析解を表示する. これより, いずれの変形速度領域においても, 変位の線形分布を確認できる. これより, 本手法が線形弾性応答を精度良く表現可能であることを確認できる.

4.3 二結晶の変形シミュレーション 図 6(a) に二結晶の初期構造の自由エネルギー分布を示す. 自由エネルギーの表示により, 格子欠陥領域が高いエネルギーを示すため, 格子欠陥の位置を容易に把握できる. 各々の粒方位が $\theta = 20^\circ, 40^\circ$ となるように初期構造を

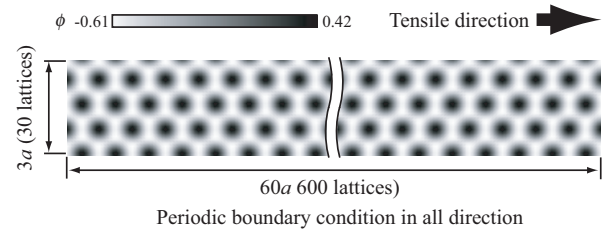


Fig. 4 The initial conditions of the single crystal.

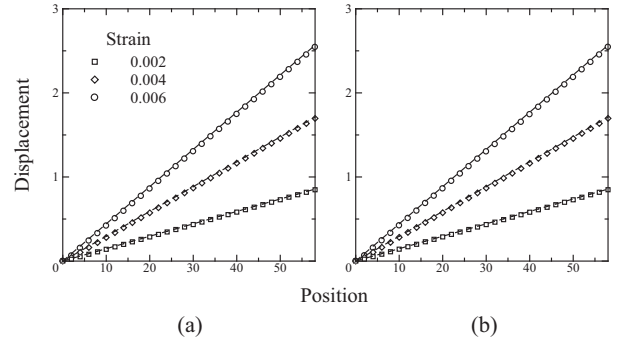


Fig. 5 Atomic displacement distributions at strain rate with (a) 5.17×10^{-5} and (b) 5.17×10^{-6} .

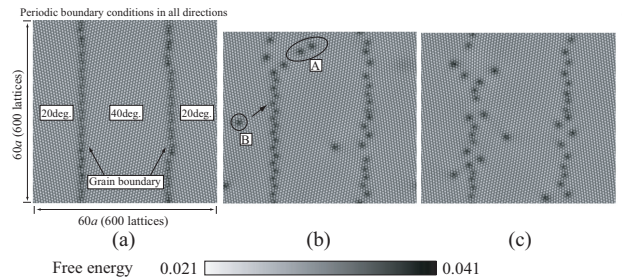


Fig. 6 (a) The initial configurations of grain boundaries and atoms in the bicrystal and, (b) and (c) the deformed states with strain $\varepsilon = 0.061$ and 0.068 .

形成し, 前節と同様の無次元ひずみ速度 $\dot{\varepsilon} = 5.17 \times 10^{-6}$ および各種パラメータを用いて解析を行う.

図 6(b), (c) に二結晶の変形過程を示す. これより, 粒界から転位が放出され, A に示す 2 つの転位が相互作用により消滅し, 更に, 転位 B が粒界に吸収されることが分かる. 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も報告されている.⁽³⁾ これより, 本手法を用いて, 二結晶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).