219

自発的な核生成を考慮した静的再結晶 Phase-Field モデルの検討

神戸大学　○高木知弘　神戸大学[院]　山中晃徳
神戸大学　冨田佳宏

Phase-Field Modeling with Spontaneous Nucleation for Static Recrystallization Process

1 緒　　言

冷間加工された金属材料を加熱すると，転位をほとんど含まない結晶粒が生成し，高い転位密度を駆動力として成長する．この新しい結晶粒の生成と成長の過程を再結晶と呼ぶ．特に，上記プロセスを熱間加工時に生じる動的再結晶と区別して静的再結晶と呼んでいる [1]．

再結晶過程は冷間加工時に形成される変形組織の影響を強く受けることが知られており，EBSD 法などにより実験的に，もしくは結晶塑性有限要素法を用いて解析的に変形組織を評価し，そこから得られる結晶方位および転位密度を用いて，Monte Carlo 法 [2, 3]，Cellular automaton 法 [4, 5]，Phase-field 法 [6]などにより再結晶粒の生成および成長過程を再現する研究が多く行われている．実験により変形組織を取得する方法は精度が高いように思われるが，観察される組織から駆動力となる蓄積エネルギーを評価する手法が確立されていないようである．結晶塑性有限要素法を用いる方法では，どの程度実際の現象と対応付けることが可能となるかという問題はあるが，実験を伴わないため体系的な評価が可能であり，今後さらなる発展が期待される．

ここで問題となるのは，核生成条件の設定である．再結晶核は「変形組織中に既に存在している」，「高角粒界に形成される」，「高いひずみエネルギーを含む領域に形成される」などが現在認められており [1]，これらの条件を満足するように核生成条件が決定されている．しかしながら，特に最後の条件は非常に曖昧であり，転位密度や蓄積エネルギーなどの閾値をパラメトリックに変化させ，実験の結果と整合するように条件を設定しているのが現状である．そのため，核生成メカニズムを完全に網羅した核生成モデルの導入もしくは数値シミュレーション上において自発的に核生成を表現することの可能なモデルの導入が必要となる．

本研究では，不連続粒成長もしくは異常粒成長により再結晶核が生成されると仮定し，これらを再現可能な Multi-Phase-Field (MPF)法を導入し，結晶塑性有限要素法による変形組織評価と連成させる手法の構築を検討する．

2 Multi-Phase-Field 法

多結晶粒成長を表現する phase-field 法はいくつか提案されているが，ここでは Steinbach ら [7] によって提案された MPF 法を採用する．本手法は，界面幅を一定に保った状態で，phase field パラメータを結晶方位差に依存する粒界エネルギーと粒界モビリティーに明確に関係付けることが可能であり，さらに三重点における挙動も矛盾無く表現することができる．以下に本モデルを概説する．

本モデルは次の自由エネルギー汎関数から出発する．

$$F=\int_V\left[\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\beta=\alpha+1}^{N}\left(-\frac{a_{\alpha\beta}^2}{2}\nabla\phi_\alpha\cdot\nabla\phi_\beta+W_{\alpha\beta}\phi_\alpha\phi_\beta\right)\right]dV \tag{1}$$

ここで，Nは用いる結晶方位の数，$a_{\alpha\beta}$と $W_{\alpha\beta}$はそれぞれ勾配係数とエネルギー障壁の高さである．ϕ_αはα番目の結晶方位を有する粒内で 1 をとり，他の粒内で 0，粒界で $0<\phi_\alpha<1$ となる phase field であり，条件

$$\sum_{\alpha=1}^{N}\phi_\alpha=1 \tag{2}$$

を満足する必要がある．ここで，$0<\phi_\alpha<1$ の領域で 1，それ以外の領域で 0 となるステップ関数σ_αを導入すると，局所的に存在する phase field の数は

$$n=\sum_{\alpha=1}^{N}\sigma_\alpha(x,t) \tag{3}$$

となり，式(1)と式(2)の N を n に置き換えることが可能となる．式(2)は付帯条件となるため，ラグランジュ乗数λを掛け式(1)に足し合わせると，phase field ϕ の時間スケールを考慮しない発展式は次のように表すことができる．

$$\mathring{\phi}_i=-\frac{\delta F}{\delta\phi_i}-\lambda \tag{4}$$

ここで，i は 1 から n の整数である．ラグランジュ乗数λを消すために，新たに次式で定義される interface field ψ

$$\psi_{ij}=\phi_i-\phi_j\quad(i<j) \tag{5}$$

を導入する．式(2)と式(5)より，ϕとψの関係を以下のように求めることができる．

$$\phi_i=\frac{1}{n}\left(\sum_{j=1}^{n}\psi_{ij}+1\right),\quad \mathring{\phi}_i=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathring{\psi}_{ij} \tag{6}$$

式(5)と式(4)よりψの発展式は，

$$\mathring{\psi}_{ij}=\mathring{\phi}_i-\mathring{\phi}_j=-\frac{\delta F}{\delta\phi_i}+\frac{\delta F}{\delta\phi_j} \tag{7}$$

と表すことができる．式(6)第 2 式に式(7)を代入すると，

$$\mathring{\phi}_i=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\mathring{\phi}_i-\mathring{\phi}_j\right) \tag{8}$$

を得ることができる．ここで，モビリティーを考慮すると，最終的なphase fieldの時間発展式を得ることができる．

$$\dot{\phi}_i=-\sum_{j=1}^{n}\frac{M_{ij}^{\phi}}{n}\left[\sum_{k=1}^{n}\left\{\left(W_{ik}-W_{jk}\right)\phi_k+\frac{1}{2}\left(a_{ik}^2-a_{jk}^2\right)\nabla^2\phi_k\right\}\right] \tag{9}$$

$N=2$ の1次元2結晶粒問題を考えると，phase fieldパラメータと物性値を次式のように関係付けることができる．

$$W_{ij}=\frac{4\gamma_{ij}}{\delta},\ a_{ij}=\frac{2}{\pi}\sqrt{2\delta\gamma_{ij}},\ M_{ij}^{\phi}=\frac{\pi^2}{4\delta}M_{ij} \tag{10}$$

ここで，δ は界面幅であり $\delta=7\Delta x$ を用いる．γ_{ij} は粒界エネルギー，M_{ij} は粒界モビリティーであり，それぞれ以下の式により方位差依存性を表現する．

$$\gamma(\Delta\theta)=\gamma_m\frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\left(1-\ln\frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right) \tag{11}$$

$$M(\Delta\theta)=M_m\left[1-\exp\left\{-5\left(\frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_m}\right)^4\right\}\right] \tag{12}$$

ここで，$\Delta\theta_m=15$ 度とし，それ以上の領域では $\gamma=\gamma_m$，$M=M_m$ とする．図1に式(11)と式(12)の分布を示す．

図2は文献[8]中の図2と同様のシミュレーション結果の一例である．黒い領域が粒界を表しており，全ての結晶粒界で同じ結晶方位差としている．図(a)中の矢印方向への粒界張力により，一番下側に位置する粒界が上の方向へ直線を保った状態で移動していることがわかる．実際は，図1のような粒界エネルギーとモビリティーの方位差依存性があるため，高角粒界のみがサブグレインの粒界エネルギーを駆動力として移動し，異常粒成長を引起す．

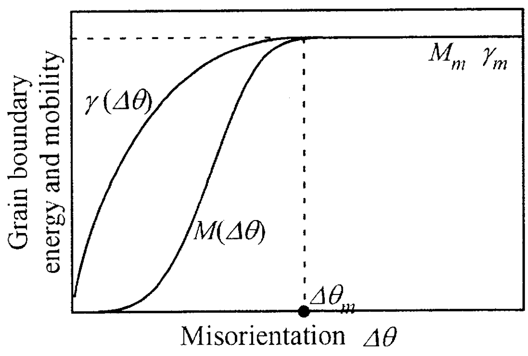

Fig. 1 Grain boundary energy and mobility

3 解析手順

結晶塑性解析により多結晶金属材料の変形挙動を評価し，そこで得られる変形組織にもとづいた再結晶粒の生成および成長シミュレーションを行う．解析手順は以下の通りである．

① 結晶塑性有限要素法により，変形組織の結晶方位 θ と転位密度 ρ を算出する．

② 結晶方位 θ と転位密度 ρ をphase-fieldシミュレーションで用いる規則格子にマッピングする．

③ サブグレインサイズ D と転位密度 ρ および結晶方位差 $\Delta\theta$ の関係式

$$D=\frac{c\Delta\theta}{\rho b} \tag{13}$$

より，各格子点におけるサブグレインサイズ D を決定する．ここで，c は定数（2次元の場合は $c=2$），b はバーガースベクトルの大きさである．（式(13)の使用は更なる検討が必要である．）

④ 各点のサイズ D よりサブグレインの中心点を算出し，その点に核を配置し通常の結晶成長シミュレーションにより，変形組織にもとづいたサブグレイン構造を作成する．

⑤ ④で得られた組織を変形過程と回復過程で形成されるサブグレイン構造とし，各サブグレインに結晶塑性解析で得られた方位 θ を持たせ，phase-fieldシミュレーションを行い，異常粒成長による核生成と引き続いて生じる粒成長過程を再現する．

結果と考察は講演当日に報告する．

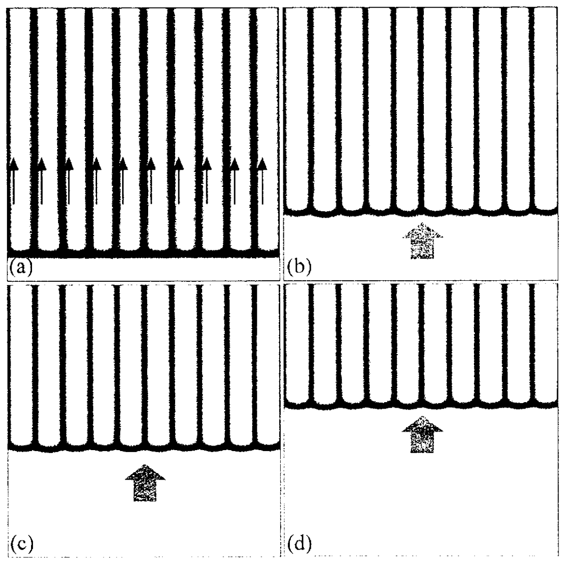

Fig. 2 Migrations of flat grain boundary

参考文献

1) F. J. Humphreys and M. Hatherly, Recrystallization and related annealing phenomena : second edition, Elsevier, (2004).
2) T. Baudin, P. Paillard and R. Penelle, Scr. Mater., **36**, 789(1997).
3) Y. B. Chun, S. L. Semiatin, and S. K. Hwang, Acta Mater., **54**, 3673(2006).
4) D. Raabe and L. Hantcherli, Comp. Mate. Sci., **34**, 299(2005).
5) C. Zambaldi, F. Roters, D. Raabe and U. Glatzel, Mater. Sci. Eng. A, **454－455**, 433(2007).
6) 高木知弘，山中晃徳，比嘉吉一，冨田佳宏，日本機械学会論文集, **73A**, (2007)，掲載予定.
7) I. Steinbach and F. Pezzolla, Physica D, **134**, 385(1999).
8) Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, Mater. Sci. Eng. A, **457**, 132(2007).