

臨界核半径を考慮したサブグレインからの 核生成と核成長に関する再結晶Phase-Fieldシミュレーション

慶應義塾大学[院] ○村松眞由 慶應義塾大学 志澤一之

Recrystallization Phase-Field Simulation on Nucleation and Nucleus Growth Based on Subgrain Coalescence Considering Critical Nucleus Radius

Mayu MURAMATSU and Kazuyuki SHIZAWA

1 緒 言

圧延の最終工程における再結晶処理によって金属の力学的物性は決定づけられるため、再結晶現象を予測することは工業的に重要である。再結晶現象は、回復、核生成、核成長の3段階に大別できる。前報¹⁾ではFCC多結晶平板の端面に強制圧縮変位を加えた際の回復過程で得られるサブグレインパターンに基づいて、核生成、核成長を再現するシミュレーション手法を構築した。しかしながら、前報では結晶核となり得る最小核半径すなわち臨界核半径を考慮するには至っていない。

そこで本研究では、まず前報と同様にFCC多結晶を対象とした転位-結晶塑性シミュレーションによりサブグレインパターンを生成する。次に、転位の蓄積エネルギーから臨界核半径を求め、大角粒界で囲まれたサブグレイン群の面積半径が臨界核半径以上のものを再結晶核候補として選定する。得られた核候補の情報に基づき、Phase-Field法を用いて多結晶内の再結晶核生成および核成長シミュレーションを試みる。なお、本解析においても前報と同様、バルジング機構および動的再結晶については扱わないこととする。

2 Phase-Field方程式

本解析で用いるGinzburg-Landau形自由エネルギーは

$$F = \int \left\{ \frac{\alpha^2}{2} (\nabla\phi)^2 + f(\phi, E_s) + E_{gb}(\phi, |\nabla\theta|) \right\} dv \dots\dots (1)$$

のように書ける²⁾。右辺第1項は界面エネルギー、第2項はBulkの自由エネルギーである。これらの項の和に結晶方位差に依存する粒界エネルギー E_{gb} を加えて表現している。ここで、 ϕ は秩序変数、 E_s は母相内での蓄積エネルギーである。 E_{gb} を結晶方位こう配の大きさ $|\nabla\theta|$ についてTaylor展開し、2次までで近似する。さらに最小作用の原理に従って、汎関数 F を ϕ と θ について変分し停留解を求めれば、自然境界条件とEuler-Lagrange方程式が得られる。後者を時間依存形に拡張することにより、 ϕ と θ の支配方程式として次式を得る。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M_\phi(\phi, \nabla\theta, T) \left[\alpha^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f(\phi)}{\partial\phi} - \frac{\partial g(\phi)}{\partial\phi} s |\nabla\theta| - \frac{\partial h(\phi)}{\partial\phi} \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\theta|^2 \right] \dots\dots (2)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = M_\theta(\phi, \nabla\theta, T) \frac{1}{\phi^2} \nabla \cdot \left[h(\phi) \varepsilon^2 \nabla\theta + g(\phi) s \frac{\nabla\theta}{|\nabla\theta|} \right] \dots (3)$$

ここで、 M_ϕ 、 M_θ は単位長さあたりの易動度であり、 ϕ 、 $\nabla\theta$ および温度 T の関数であるとする。界面係数 α 、粒界エネルギーの影響度 s および ε は定数である。また、

$g(\phi)$ および $h(\phi)$ は母相中での方位の影響を消去できるように $g(\phi) = h(\phi) = \phi^2$ とする。式(1)の $f(\phi)$ は、核生成においてはWarrenら²⁾が提案した次の関数形を採用する。

$$f(\phi) = \frac{a}{2} (1-\phi)^2 \dots\dots (4)$$

一方、核成長においては蓄積エネルギーを駆動力とするためにTakakiら³⁾が提案した次の関数を用いる。

$$f(\phi) = \{1 - p(\phi)\} f_m(\rho) + p(\phi) f_r(\rho) + Wq(\phi) \dots\dots (5)$$

ここで、式(4)における a はサブグレイン粒界の移動の駆動力に関するエネルギーである。また、式(5)における $f_m(\rho)$ および $f_r(\rho)$ はそれぞれ変形母相と再結晶粒内の蓄積エネルギー、 W はエネルギー障壁、 $q(\phi)$ は二重井戸ポテンシャルであり、 $q(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$ と表される。また、 $p(\phi)$ は $p(\phi) = \phi^3(10-15\phi+6\phi^2)$ であり、 $p(0) = 0$ 、 $p(1) = 1$ および $p'(0) = p'(1) = 0$ を満足する。再結晶粒内の転位密度は変形母相内に比べて十分小さいため、 $f_r(\rho) = 0$ とし、母相内では $f_m(\rho) = E_s$ とする。

3 解析方法

3.1 サブグレイン形成と核候補の選定 再結晶の3段階過程を再現するためには、まず再結晶核の基点となるサブグレインを形成させる必要がある。そこで、多結晶体内における転位パターンに対する反応-拡散モデル⁴⁾を用いて転位-結晶塑性FEM解析を行い、サブグレインパターンを発現させる。その詳細については文献4)を参照されたい。変形後の結晶方位については各サブグレイン内で平均化した値を用いる。このようにして得られたサブグレインから再結晶の核候補となるサブグレイン群の選定を行う。本解析では、結晶方位に基づいて再結晶核となり得る結晶方位差 10° 以上の大角粒界で囲まれ、かつ $r^* = 2\sigma/E_s$ より算出される臨界核半径以上の面積半径を有するサブグレイン群を核候補とする。ここで σ は界面エネルギーであり、 E_s は $0.5(\rho_m - \rho_r)\mu\bar{b}^2$ で表される転位の蓄積エネルギーである。ここで ρ_m 、 ρ_r はそれぞれ母相および再結晶粒の不動転位密度、 μ は剛性率、 \bar{b} はburgersベクトルの大きさであり、 $\rho_m \gg \rho_r$ より $E_s = 0.5\rho_m\mu\bar{b}^2$ と近似できる。本来、局所的転位密度から求めた臨界核半径にしたがって局所的に核候補を選定するのが望ましいが、本研究では簡単のため、解析領域内の最大蓄積エネルギーから算出される最小臨界核半径に基づいて再結晶核の選定を行う。また、ここで算出する蓄積エネルギーは駆動力として後の核成長解析においても用いる。

3.2 核生成 3.1節で選定した再結晶核候補においては $\phi = 1$ 、その他の母相部分では $\phi = 0$ と設定する。次に、

Phase-Field法を用いてサブグレイン境界の曲率に応じた移動および隣接するサブグレイン同士の方位回転を解析し、サブグレインを合体させることで核生成を再現する。核生成の計算においては母相への ϕ および θ の拡散を停止させ、再結晶核内($\phi=1$ の領域)のみ解析を行う。

3.3 核成長 3.2節の核生成解析によって得られた核の結晶方位および各核の生成に要した時間に基づいて、Phase-Field方程式を用いて核成長解析を行う。あらかじめ全ての核を解析領域内に配置した上、核生成時刻に達した時点でそれぞれの核の成長を開始させる。本解析では母相内でも ϕ および θ を拡散させるが、母相内の初期結晶方位は一律とする。また、再結晶粒の衝突後、粒同士の合体を防ぐため、 $M_\theta(\phi, \nabla\theta, T) = (1-\phi)^2 \bar{M}_\theta$ とおく。

4 解析結果および検討

4.1 サブグレイン形成 転位-結晶塑性解析においては、図1に示すような平面ひずみ状態にある $20\mu\text{m} \times 20\mu\text{m}$ のCu多結晶平板の端面に30%の強制圧縮変位を与える。すべり系にはAsaroの平面2重すべりモデルを用いる。図2はFEM解析によって得られた30%圧縮時における結晶方位の分布図である。黒線はサブグレイン境界を表しており、そのうち 10° 以上の大角粒界を白線で表示している。発見したサブグレインの方位情報に基づき、3.2節で述べた方法にしたがって、高さ H 、幅 W の領域内で再結晶核候補の選定を行った結果が図3である。図3(b)の $\phi=1$ の部分が再結晶核候補となるサブグレイン群であり、図3(c)は図3(a)の母相内を平均化して表示した結晶方位である。図3(a)と図3(b)の比較から、1つの核候補は1~6個のサブグレインからなることが確認できる。前報の結果と比較すると、再結晶核数が少なくなっており、それらの面積半径のばらつきは減少している。

4.2 核生成 次に、再結晶核候補から上述のPhase-Field方程式系を用いて核生成解析を行う。解析領域の寸法を $W \times H = 10\mu\text{m} \times 13\mu\text{m}$ 、代表長さを最大再結晶核幅 $l_1 = 2.5\mu\text{m}$ 、代表時間を $t_1 = l_1^2 / (\sigma m)$ として各量を無次元化し、無次元量に*を付けて表記する。差分格子間隔は $\Delta x^* = 0.02$ 、差分時間間隔は $\Delta t_0^* = 1.5 \times 10^{-5}$ である。また、 $\sigma = 1.0 \text{ J/m}^2$ 、 $m = 41.1 \mu\text{m}^3/\text{N}\cdot\text{ms}$ とし²⁾、その他の数値パラメータは $\alpha^* = 0.015$ 、 $s^* = 0.05$ 、 $\varepsilon^* = 00008$ 、 $M_\phi^* = 300$ 、 $\bar{M}_\theta^* = 3000$ 、 $a^* = 4.0$ とする。核生成解析結果を図4に示す。図4(a)、(b)はそれぞれ図3の領域Aおよび領域Bについての ϕ および θ の時刻歴を表した図である。図4(a)では、サブグレイン境界が曲率の中心へ移動していく様子ならびに隣接するサブグレイン同士の結晶の回転によってサブグレインが合体していく様子が表現されている。また、図4(a)と(b)を比較すると、核生成完了時間が、サブグレイン群ごとに異なっていることがわかる。

4.3 核成長 4.2節で得られた核生成解析の情報に基づき、Phase-Field方程式を用いて核成長解析を行う。核成長においても代表量は核生成と同じ値を用い、差分時間間隔は $\Delta t_1^* = 1.0 \times 10^{-8}$ とする。その他の数値パラメータには $\alpha^* = 0.015$ 、 $s^* = 0.1$ 、 $\varepsilon^* = 0$ 、 $M_\phi^* = 300$ 、 $\bar{M}_\theta^* = 50$ のような値を用いる。図5は各時刻における ϕ および θ の分布図である。図5(a)および(b)のように、4.2節ですでに得られている核成長開始までの潜伏時間に応じて再結晶

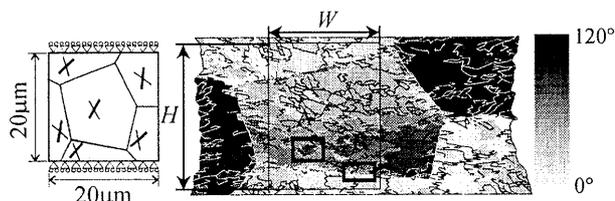


Fig.1 Polycrystal model Fig.2 Crystal orientation of subgrain

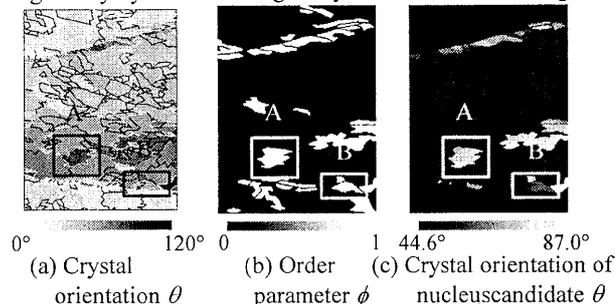


Fig.3 Crystal nuclei in initial state for nucleation simulation

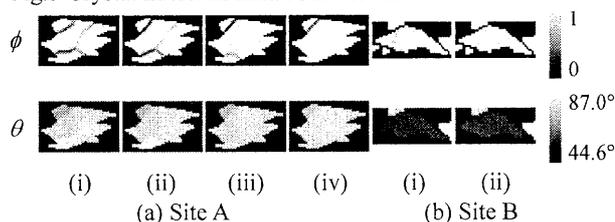


Fig.4 Results of Phase-Field simulation of nucleation ($t^* [\times 10^{-3}]$: (i) 0.45, (ii) 0.90, (iii) 1.8, (iv) 2.7)

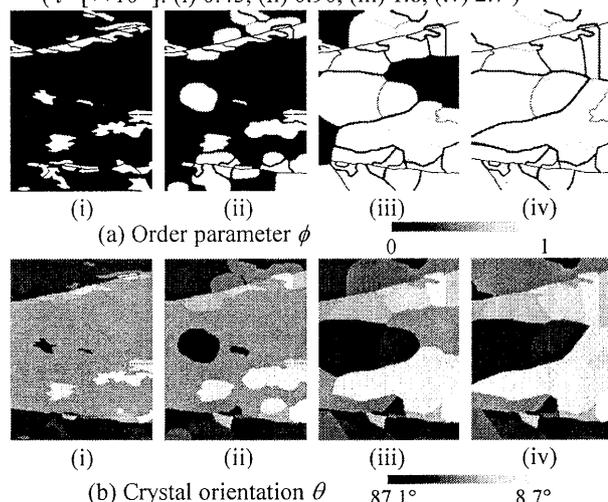


Fig.5 Results of Phase-Field simulation of nucleus growth ($t^* [\times 10^{-3}]$: (i) 0, (ii) 0.3, (iii) 0.9, (iv) 2.0)

核が徐々に成長を開始する様子が、一定核生成速度モデルなどを用いることなく再現されている。前報の結果と比較すると、再結晶完了後の粒径は増大したものの、それらのばらつきは減少している。

5 結 言

転位-結晶塑性解析より得られるサブグレインパターンから臨界核半径を考慮して核候補を選定し、再結晶核生成・核成長に関するPhase-Fieldシミュレーションを行うことで、より実現に即した再結晶現象が再現されるとともに、より均一な組織が形成される。

参考文献

- 1) 村松真由, 他4名, 理応力講論, **56**, 463 (2007).
- 2) J. Warren, et al., *Acta Mater.*, **51**, 6035 (2003).
- 3) T. Takaki, et al., *Proc. Plasticity '06*, 469 (2006).
- 4) 青柳吉輝, 他3名, 理応力講論, **56**, 461 (2007).