

転位蓄積による核生成を考慮したMulti-phase-field理論 および転位-結晶塑性論に基づく動的再結晶シミュレーション

産業技術総合研究所 ○村松眞由 慶應義塾大学[院] 佐藤慎一 慶應義塾大学 志澤一之

A Dynamic Recrystallization Simulation Using Dislocation-crystal Plasticity and Phase-field Theories Considering Nucleation Based on Dislocation Accumulation

Mayu MURAMATSU, Shinichi SATO and Kazuyuki SHIZAWA

1 緒 言

金属の熱間加工工程では、熱的ゆらぎによって粒界近傍に再結晶核が生成され、変形とともに動的再結晶現象が進行することが知られている。その際、生成された核は変形・回転を受けながら成長していく。前報¹⁾で筆者らは、Multi-phase-fieldモデルと転位-結晶塑性モデルを連成させ、核成長と変形にともなう転位密度変化を結晶の硬化係数に反映させた動的再結晶モデルを構築した。また、得られたモデルを用いて動的再結晶シミュレーションを行った。しかしながら、実現象における動的再結晶では、変形中に形成される高転位密度領域では新相内においても核が生成されるのに対し、前報のモデルでは変形母相および新相中の副次的な核生成は考慮されていないという問題を有している。そこで本研究では、前報のモデルに改良を施し、蓄積した転位密度に立脚した核生成のクライテリアを設け、変形過程における核生成を考慮した動的再結晶モデルを構築する。さらに、本モデルに基づいてマルチフィジックス解析を行い、微視組織の発展とマクロな応力-ひずみ曲線の増減との関係を考察する。また、環境温度にともなう粒成長の易動度変化に対するマクロ特性の応答についても検討する。

2 Multi-phase-fieldモデル

Multi-phase-fieldモデルでは、結晶粒ごとの秩序変数を用いて多数の核成長を同時に解析する。結晶粒 α の秩序変数を ϕ^α ($0 \leq \phi^\alpha \leq 1$)とし、 $\psi^{\alpha\beta} \equiv \phi^\alpha - \phi^\beta$ のように定義されるInterface field²⁾および $\sum_\alpha \phi^\alpha = 1$ を考慮すれば、

$$\frac{\partial \phi^\alpha}{\partial t} = - \sum_{\beta=1}^N \frac{M_\phi^{\alpha\beta}}{N} \sum_{\gamma=1}^{q-1} \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^{\alpha\gamma^2} - \alpha^{\beta\gamma^2}) \nabla^2 \phi^\gamma + \frac{\partial f(\phi^\alpha, \phi^\gamma)}{\partial \phi^\alpha} - \frac{\partial f(\phi^\beta, \phi^\gamma)}{\partial \phi^\beta} \right\} \quad (1)$$

が得られる。²⁾ ここで、 N は総結晶粒数、 $M_\phi^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間の易動度および $\alpha^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間のこう配係数である。一方、Bulkの自由エネルギー $f(\phi^\alpha, \phi^\beta)$ には、転位の蓄積エネルギーを粒成長の駆動力とする $f(\phi^\alpha, \phi^\beta) = \{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\} f_d(\rho) + W^{\alpha\beta} q(\phi^\alpha, \phi^\beta)$ を用いる。ここで、 $W^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間のエネルギー障壁である。また、 $f_d(\rho)$ は相 α - β 間の蓄積エネルギー差であり、相 α - β 間の局所蓄積エネルギー $f_d(\rho) = E_s^{\alpha\beta}$ を用いて $f_d(\rho) = E_s^{\alpha\beta} = E_s^\alpha - E_s^\beta$ と表わされる。本研究では簡単のため、相 α が母相かつ相 β が新相のとき $E_s^{\alpha\beta} = E_s$ 、相 α が新相かつ相 β が母相のとき $E_s^{\alpha\beta} = -E_s$ とする。ここで、 E_s は局所の蓄積転位エネルギーであり、相 α の転位密度 ρ^α 、横弾性係数 μ およびBurgersベクトルの大きさ b を用いて $E_s = \sum_\alpha E_s^\alpha = \sum_\alpha \rho^\alpha \mu b^2 / 2$ と表せる。まず、簡単のため2相間

題に対する $f(\phi)$ 、 $p(\phi)$ および $q(\phi)$ を考える。このとき $f(\phi)$ が $E_s^{\alpha\beta}$ を駆動力とした二重井戸形関数となるために満たすべき条件は、 $f(0) = E_s^{\alpha\beta}$ 、 $f(1) = 0$ 、 $f'(0) = 0$ および $f'(1) = 0$ である。以上の条件を満足する関数 $q(\phi)$ は $q(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$ である。一方、関数 $\{1 - p(\phi)\}$ は、指数関数を用いて $\{1 - p(\phi)\} = \{(2\phi e^\phi e^{1-\phi}/e) - (2e^\phi e^{1-\phi}/e) + 3\}(1-\phi)^2$ と表す。さらに $f(\phi)$ を $f(\phi^\alpha, \phi^\beta)$ とするため、 ϕ および $(1-\phi)$ をそれぞれ ϕ^α および ϕ^β と置き換えれば、 $\{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\}$ および $q(\phi^\alpha, \phi^\beta)$ が次式のように得られる。

$$\{1 - p(\phi^\alpha, \phi^\beta)\} = \left(\frac{2}{e} \phi^\alpha e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} - \frac{2}{e} e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} + 3 \right) \phi^{\beta^2} \dots \dots \dots (2)$$

$$q(\phi^\alpha, \phi^\beta) = \phi^{\alpha^2} \phi^{\beta^2} \dots \dots \dots (3)$$

以上に基づく複相形のパルクの自由エネルギーを図示すると図1のようになる。

3 転位-結晶塑性モデル

硬化則にはPan-Rice形のすべり速度硬化則:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0^{(k)} \operatorname{sgn}(\tau^{(k)}) \left| (\tau^{(k)} / g^{(k)}) \right|^{1/m} \dots \dots \dots (4)$$

を用いる。ここで、 $\dot{\gamma}_0^{(k)}$ は参照すべり速度、 $\tau^{(k)}$ は分解せん断応力、 $g^{(k)}$ は流れ応力および m はひずみ速度感度指数である。流れ応力 $g^{(k)}$ の発展式および硬化係数 $h^{(k\lambda)}$ はそれぞれ次式のように表される。

$$\dot{g}^{(k)} = \sum_\lambda h^{(k\lambda)} \left| \dot{\gamma}^{(\lambda)} \right|, \quad h^{(k\lambda)} = ac\mu\Omega^{(k\lambda)} / (2L^{(\lambda)} \sqrt{\rho^{(\lambda)}}) \quad (5)$$

ここで、 μ は横弾性係数、 a および c は0.1および1のオーダーの数値係数である。また、 $\Omega^{(k\lambda)}$ は各すべり系間の転位相互作用行列、 $L^{(k)}$ は転位の平均飛行距離および $\rho^{(\lambda)}$ は λ すべり系に蓄積した転位密度である。転位の平均飛行距離には転位密度依存形モデルを用いる。また、転位密度の定義には、初期転位密度 $\rho_0^{(k)}$ 、GN転位密度テンソルのノルム $\rho_G^{(k)}$ 、GN不適合度テンソルのノルム $\rho_\eta^{(k)}$ および対消滅を起こした転位密度 $\rho_R^{(k)} = 4f_c^2 \rho_\eta^{(k)^2}$ を用いて次のように表される全転位密度を採用する。³⁾

$$\rho^{(k)} = \rho_0^{(k)} + \rho_G^{(k)} + \rho_\eta^{(k)} - \rho_R^{(k)} \dots \dots \dots (6)$$

4 計算スキーム

上述の転位-結晶塑性モデルとMulti-phase-fieldモデルとを連成させて動的再結晶解析を行う。まず、粒界等の高転位密度サイトに生成された再結晶核に対して、式(1)を用いてPhase-field解析を行えば、転位の蓄積エネルギー差が駆動力となって再結晶核が成長を開始する。このとき、母相が新相へと変化した領域では、転位密度およびすべり値を初期化する。その際、そのような領域に与える結晶方位は初期に結晶が有していた方位とする。⁴⁾ 核成長解析から得られた情報を結晶塑性有限要素法に与え、式(4)および式(5)を用いて変形解析を実施する。その結果、

結晶変形による転位密度が式(6)より得られる。更新された転位密度を差分格子点に戻し、再度核成長解析を行う。ただし、変形解析から得られた局所転位密度は、転位の蓄積エネルギーを介して式(1)に与えられる。また、転位密度に立脚した核生成のクライテリオンとして、臨界転位密度 ρ_c を定義し、 ρ_c に達した一つの有限要素の重心から臨界核半径 r_c 内に存在する有限要素がほぼ臨界転位密度 ρ_c を満たしていれば、その領域を再結晶核とする。例えば相 α の存在する領域において $\phi^\beta \geq 0.7$ に変化した領域では相 α から相 β へと相変化したとみなし、転位密度 ρ を $(1-\phi^\beta)\rho + \phi^\beta\rho_0$ へと更新し、すべり値も初期化する。結晶方位は隣接領域と大角化するランダムな値を与える。ただし、 $\rho_c = 10\mu\text{m}^{-2}$ である。以上の操作をステップ毎に繰り返し、動的再結晶解析を実施する。

5 シミュレーション結果および検討

本研究における解析対象は $H \times L = 40\mu\text{m} \times 40\mu\text{m}$ のアルミニウム平板とし、上端に10%の強制せん断変位を与える(図2)。また、全領域において初期転位密度を $\rho_0 = 0.001\mu\text{m}^{-2}$ とし(図3(a))、領域は三結晶からなるものとする(図3(b))。本研究では、転位-結晶塑性モデルはFEMを用い、Multi-phase-fieldモデルはFDMを用いてFEM-FDMハイブリット解析を行う。FEMの総要素数は9216およびFDMの総格子点数は40401である。なお、環境温度による粒界易動度の変化について検討するため、 $M_\phi^{\alpha\beta} = 400\text{m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ (Case (a)), $M_\phi^{\alpha\beta} = 700\text{m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ (Case (b)), $M_\phi^{\alpha\beta} = 2000\text{m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ (Case (c))および $M_\phi^{\alpha\beta} = 9000\text{m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ (Case (d))の4つの条件に基づいて数値解析を行う。ここでは環境温度が高くなるほど易動度も大きくなると考える。数値解析Case (c)より得られた転位密度および結晶方位分布の時間変化をそれぞれ図4(a)および(b)に示す。まず、図4(a)(i)より粒界付近で顕著な転位蓄積が見られる。同時に、図4(b)(i)より高転位密度サイトとなる三重点において新たな結晶粒が生成されている様子がわかる。また、図4(a)(ii), (iii)および(b)(ii), (iii)より、再結晶核は転位の蓄積が顕著な粒界に沿って成長しており、転位密度分布に応じた再結晶現象が表現できていることがわかる。さらに変形が進行した図4(a), (b)(iv)左下

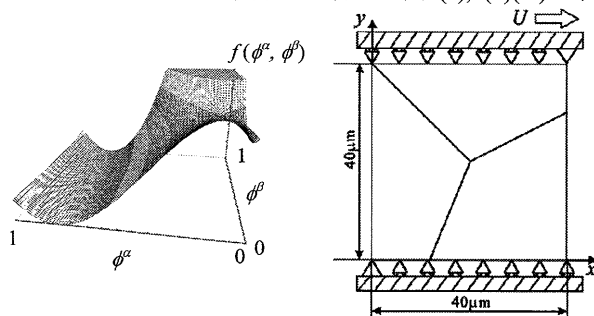


Fig. 1 Illustration of free energy of bulk Fig. 2 Computational model

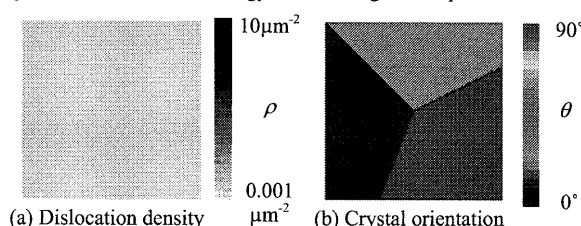


Fig. 3 Initial distributions

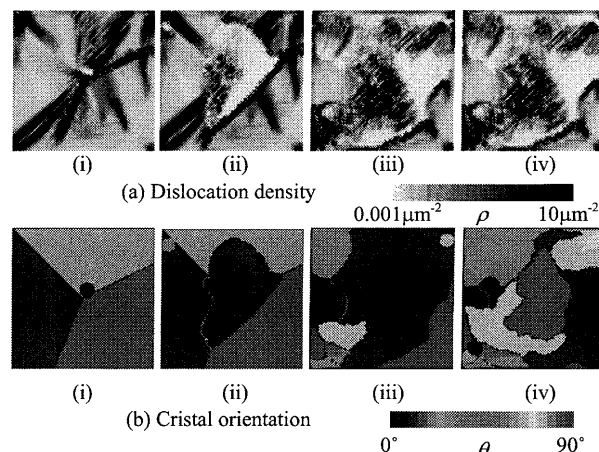


Fig. 4 Temporal distributions of dislocation density and crystal orientation ($U/L[\%]$: (i) 0.73, (ii) 1.06, (iii) 1.45, (iv) 1.96)

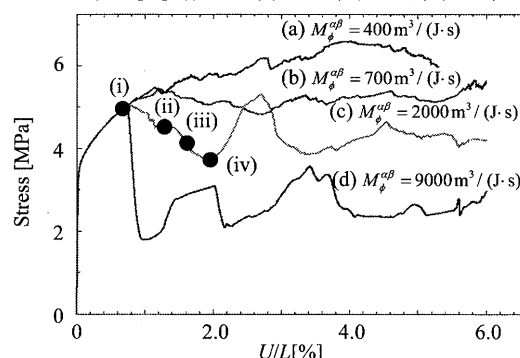


Fig. 5 Nominal stress-strain curve

の領域においては、成長した核の粒界付近に新たな高転位密度サイトが形成され、副次的な生成核が発現している様子がわかる。一方、図5は得られた応力-ひずみ線図である。変形による転位蓄積に依存した硬化および粒成長による焼鈍に依存した軟化を繰り返す挙動が再現されており、副次的な再結晶核の生成および成長が起こることによって、複数回のピークが発現している。また、環境温度が低い場合は結晶成長と加工硬化がバランスすることによって比較的顕著なピークは見られないのに対し、環境温度が高くなるほど変形加工よりも再結晶速度が速くなり、応力-ひずみ線図に発現するピーク回数が増えていることがわかる。

6 結 言

- 1) 蓄積転位密度に基づくクライテリオンを用いて核生成モデルを構築すれば、副次的核生成を考慮した動的再結晶解析が可能となり、応力-ひずみ線図が硬化と軟化を複数回繰り返す様子が再現される。
- 2) 得られたマルチフィジックスモデルを用いて数値解析すれば、易動度の変化によって結晶成長と加工硬化のバランスが変わり、それに応じて応力-ひずみ曲線が異なる挙動を示す様子が再現される。

参考文献

- 1) 佐藤, 他 3 名, 第 54 回材工講論, (2010), pp. 76-77.
- 2) I. Steinbach, et al., *Physica D*, (1999), pp 385-393.
- 3) Y. Aoyagi and K. Shizawa, *Int. J. Plasticity*, (2007), pp 1022-1040.
- 4) 村松, 他 3 名, 第 60 期材講論, (2011), p. 215.