粒成長を伴う超塑性変形挙動のシミュレーション*

金 炳 男 平賀啓二郎

金属材料技術研究所力学機構研究部

J. Japan Inst. Metals, Vol. 64, No. 5 (2000), pp. 275-278
Papers from JIM Fall Meeting (1999)
© 2000 The Japan Institute of Metals

Simulation of Superplastic Deformation Behavior Accompanied by Concurrent Grain Growth

Byung-Nam Kim and Keijiro Hiraga

Mechanical Properties Division, National Research Institute for Metals, Tsukuba 305-0047

Superplastic deformation behavior is simulated in 2 dimensions by incorporating the mechanisms of grain boundary diffusion and concurrent grain growth of both static and dynamic growths. The relationship between microstructural changes and mechanical properties is examined under various loading conditions. Although grain boundary diffusion produces an increase in the aspect ratio of grains, for large grain boundary mobility, the increase is restricted by the rapid migration of the grain boundary. With increasing aspect ratio, the stress exponent decreases and the grain size exponent increases, which are 1 and 3 for equiaxed grains, respectively. From the observation of the simulated microstructures, it is also found that grain boundary sliding is related with the migration of grain boundaries.

(Received December 13, 1999)

Keywords: grain growth, superplastic deformation, stress, strain rate, aspect ratio, grain boundary sliding

1. 緒 言

高温における多結晶体の変形は、転位の活動か空孔の拡散により行われる。多結晶体の変形が空孔の拡散により行われると、結晶粒は応力軸に沿って伸び、粒界では結晶粒間の連続性を保つためすべりが生じる。これを Lifshitz 粒界すべりと呼ぶ¹⁾。Lifshitz 粒界すべりは超塑性変形機構の一つとして知られており、特に超塑性変形が空孔の拡散に支配される領域では主な変形機構となり得る。また、空孔の拡散には粒内拡散²⁾と粒界拡散³⁾があるが、結晶粒が小さい場合は一般に粒界拡散が支配的であるから、本研究では粒界拡散による Lifshitz 粒界すべり機構を変形機構として取り入れた。

一方、超塑性変形中には静的粒成長と動的粒成長が同時に起きることが知られており、本研究では超塑性変形中に起きる静的粒成長、動的粒成長および Lifshitz 粒界すべり機構を同時に取り入れたシミュレーションを行い、微視組織の変化とそれに伴う力学的挙動との関係を調べた。

2. シミュレーションアルゴリズム

本研究では、静的粒成長、動的粒成長および Lifshitz 粒界すべり機構を同時に考慮したシミュレーションを行うのに際して、これら三つの機構は互いに独立であると仮定した。す

なわち、各機構間の相互作用は無視し、ある微小時間の間各機構が同時にかつ独立に働くことにした。

まず、多結晶体の静的粒成長に関しては、著者の一人が最近2次元シミュレーションを行った際に用いたアルゴリズムを使用した⁴⁾。このシミュレーションでは粒界を直線として扱い3重点の移動挙動に焦点を合わせた。時間に対する粒径の2乗則成長挙動と Louat 分布で近似できる粒径分布が得られた。また、動的粒成長に関しては粒界拡散モデルを用いた。著者らは、材料が変形する際粒界拡散する物質が動的粒成長を引き起こすとのモデルを提案したが⁵⁾、その概念を本シミュレーションアルゴリズムに導入した。

次は、粒界拡散による微視組織の変化を表すためのモデリングを行った。微視組織の巨大変形を扱い易くするため粒界は直線であるとした。粒界 facet におけるポテンシャルは一定であると仮定し、3重点における応力集中は無視した。また、塑性変形中に粒界におけるせん断応力は完全に解放すると仮定し、垂直応力により発生するポテンシャルは負荷応力 σ と粒界 facet の応力軸に対する角度 θ の関数として $\sigma \cos^2 \theta$ のように表されるとした。この場合、Fig. 1 に示すような粒界 facet 0 における flux J' は

$$J' = \frac{D_b \delta}{\Omega k_B T} \sum_i^4 \frac{\Delta \mu_i}{\Delta s_i} \quad (1)$$

で近似的に表すことができ、この粒界 facet を挟む両粒界面の相対速度 v_δ は

* 1999年11月20日日本金属学会秋期大会において発表

$$v_{\delta} = -\Omega \operatorname{div} J' = \frac{\Omega D_b \delta}{l_0 k_B T} \sum_i \frac{(\cos^2 \theta_0 - \cos^2 \theta_i)}{\Delta s_i} \quad (2)$$

となる．ここで， D_b は粒界拡散係数， δ は粒界の厚さ， Ω は原子の体積， k_B は Boltzman 定数， T は絶対温度， Δs_i は粒界 facet 0 と粒界 facet i 間の平均距離， $\Delta \mu_i$ は粒界 facet 0 と粒界 facet i 間のポテンシャル差， l_0 は粒界 facet の長さである．(+) の v_{δ} は両粒界面が遠ざかり δ が大きくなるとの意味になるが，実際は δ が一定になるように物質の定着が行われ，結晶粒中心間の距離が増加する．

粒界における相対的膨張・収縮速度 v_{δ} が分かると，材料全体の巨視的歪み速度 $\dot{\epsilon}$ が計算できる．すなわち，幅 L_x ，長さ L_y の試験片に対して荷重応力 σ が試験片の長さ方向 (y 軸) に作用している時，試験片内部にある長さ ds ，角度 θ の粒界 facet が寄与する歪み速度は $v_{y\delta}/L_y$ である．ここで， $v_{y\delta}$ は v_{δ} の y 軸方向成分 ($v_{\delta} \cos \theta$) である．また，この粒界 facet の試験片幅に対する割合は $\cos \theta ds/L_x$ であるから，この粒界 facet において， v_{δ} による巨視的歪み速度に対する寄与 $d\dot{\epsilon}$ は $v_{\delta} \cos^2 \theta ds/(L_x L_y)$ である．したがって，巨視的歪み速度 $\dot{\epsilon}$ は

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{L_x L_y} \int v_{\delta} \cos^2 \theta ds \quad (3)$$

より得られる．式(3)の積分は試験片内の全粒界に対して行う．

一方，結晶粒 0 と結晶粒 i の内部において (Fig. 1)，拡散に関与しない部分あるいは拡散中心点 (diffusion center)⁶⁾ の移動速度 v_0 と v_i は，粒界面の相対速度 $v_{\delta i}$ と

$$v_0 - v_i = v_{\delta i} \quad (4)$$

の関係にあるので，結晶粒 0 と隣接するすべての結晶粒に対する式(4)を合わせると，

$$v_0 = \frac{1}{N} \sum_i v_{\delta i} + \frac{1}{N} \sum_i v_i \quad (5)$$

の関係が得られる．ここで， N は隣接する結晶粒の数である．式(5)において，右辺の第 1 項は式(2)により得られる．また，第 2 項は隣接する結晶粒の平均移動速度であるので，巨視的歪み速度より推定できる．すなわち， $\dot{\epsilon}$ で均一変形する場合における結晶粒 0 の拡散中心点の移動速度が，式(5)の第 2 項に対する近似となる．このようにして各結晶粒の拡散中心点の移動速度が得られるが，本研究では，拡散中心点は結晶粒の重点に一致すると仮定した．

次に粒界の移動速度について考える．両粒界面に属する物質が同程度に粒界拡散に寄与する場合は，粒界の移動速度 v_b は単純に両結晶粒の移動速度の平均になる．しかし，ほとんどの場合，粒界拡散が起こる温度域ではすでに静的粒成長が起きている．静的粒成長が起きていることは，粒界を挟む両粒界面におけるポテンシャルが異なることを意味する．例えば，Fig. 1 で粒界が現在結晶粒 0 の方向に移動しているとすると，結晶粒 0 の粒界面のポテンシャルは結晶粒 i のそれより高いことを意味する．もしこの粒界に物質が流れ込むと，その物質はポテンシャルの低い結晶粒 i の粒界面に定着する．この場合，粒界と結晶粒 0 の拡散中心点との距離は変化しないから， $v_b = v_0$ となる．逆に，物質が粒界から流れていく場合は， $v_b = v_i$ となる．この点が，動的粒成長に対す

Fig. 1 Grain boundary diffusion model.

る粒界拡散モデルの特徴である⁵⁾．

最後に，3 重点の移動速度はそれにつながっている三つの粒界の移動速度の平均より得られる．本研究では直線粒界を仮定しているため，以上のような方法で最終的に 3 重点の移動速度を求めて位置を移動させた後，その 3 重点を粒界でつなぐことによって変形した微視組織を得ることができる．また，本アルゴリズムでは，粒界すべり機構を直接には考慮していないが，粒界拡散により粒界が移動する過程で結晶粒間に空隙が生じないようにしているため，結果的には粒界すべりを緩和機構として導入したことにもなる (Lifshitz 粒界すべり機構)．

シミュレーションでは，まず塑性変形がない場合に静的粒成長が定常状態で起きる微視組織を得るため，6000 個の結晶粒で構成される Voronoi 組織を周期的境界条件下で粒成長させた．定常状態は粒径が約 1.5 倍成長した時得られ，その際の結晶粒の数は約 3300 個であった．これを初期微視組織としたが，この初期微視組織は等軸結晶粒と Louat 関数で近似できる粒径分布を示した⁴⁾．

一方，上記のアルゴリズムは一定応力の条件の場合であるが，試験片の寸法を歪みで補正すると，一定歪み速度，一定変位速度および一定荷重においてもシミュレーションできる．

3. 結果および考察

粒界拡散に起因する歪み速度は

$$\dot{\epsilon} = \beta \frac{D_b \delta \Omega \sigma}{k_B T R^3} \quad (6)$$

で表されるが，係数 β に関してはモデルによって様々な値が提案されている．単一球形結晶粒に対しては，Coble³⁾ が $3.7/\pi$ ，Green⁷⁾ が 2 を提案し，正六角形の結晶粒で構成された 2 次元多結晶に対しては，Raj と Ashby⁸⁾ が 5.50，Ashby と Verrall⁹⁾ が 41.6，Ashby ら¹⁰⁾ が 1.15，Spingarn と Nix¹¹⁾ が 6.93 を提案した．これに対して本シミュレーションでは 1.94 が得られ，単一球形結晶粒に対する β 値と近い値となった．本モデルは粒界を直線とし，粒界 facet 上での応力は一定にするなどの近似を用いているが，結果的にはかなり妥当なモデルであると考えられる．一方，単一円形結晶粒に対する β 値は 1 である．

Fig. 2 Microstructural changes by stress-directed grain boundary diffusion. r_a is the aspect ratio, and t_n is the normalized time of $tD_b\delta R_0^{-3}$, where t is the time. The stress axis is vertical.

Fig. 2 は, $M\gamma R_0^{-2}t_{1.5}=3.080$ および $\Omega\sigma/k_B T=0.15$ の負荷応力一定の条件でシミュレーションされた微視組織の変化を示す。ここで, M は粒界のモビリティ, γ は粒界エネルギー, R_0 は結晶粒の平均初期半径, $t_{1.5}$ は R_0 が $1.5R_0$ まで静的粒成長するのにかかる時間である。粒界拡散により結晶粒は応力方向に伸び, 応力軸と垂直方向では収縮が生じる。その結果, Fig. 2 に示す結晶粒 B と C は結晶粒 A に近づき, この両者が後にすべりを起こしている。Lifshitz 粒界すべり機構では粒界すべりと拡散がペアで起きるとしているが, シミュレーションによる微視組織の変化をよく観察すると, 粒界すべりは粒界移動すなわち粒成長と深く関係していることが分かる。例えば, Fig. 2(c) において, 結晶粒 B と C がぶつかる直前には両者の間に収縮している結晶粒があり, その結晶粒の収縮・消滅が結晶粒 B および C の結晶粒 A に対する見かけ上の粒界すべりと深く関係している。すなわち, 粒界すべりにより生じる微視組織の幾何学的な不調和を, 静的および動的粒成長における粒界移動が緩和していると言える。

また, 粒界移動はアスペクト比の増加も抑制していることが分かる。粒界拡散はアスペクト比の増加をもたすが, 速い粒界移動は 3 重点間の衝突・再構成過程を促進してアスペクト比の増加を抑制する。Fig. 3 はアスペクト比の変化を示すが, 粒界のモビリティ M が大きくなるにつれて変形中のアスペクト比が抑制されている。 M が極端に小さい場合は, このようなアスペクト比の増加を抑制する機構が働かず, 巨視歪みは結晶粒の歪みと一致するようになる。

同じ初期応力に対して, 負荷条件の違いによる巨視歪みの変化を Fig. 4 に示す。歪みの増加速度は, 一定歪み速度 > 一定変位速度 > 一定荷重 > 一定応力の順であり, 応力およびアスペクト比の増加速度も同じ順である。粒界のモビリティによって各負荷条件における歪みの増加速度は少し変化するが, この順は変わらない。

一方, 粒界拡散による歪み速度は式(6)で表されるが, 変形中生じるアスペクト比の増加は拡散距離の増加をもたらし, 歪み速度と応力, 粒径との関係は式(6)から離脱する。すなわち, Fig. 5(a) に示すように, 等軸結晶粒に対する粒径指数は 3 であるが, 粒界拡散によりアスペクト比が増加すると, 歪み速度が減少するため粒径指数は見かけ上大きくなる。Fig. 3 に示すように, アスペクト比が歪みにあまり依存しない領域では, 粒径指数も 3 に近くなる。

Fig. 3 Variation of the aspect ratio at constant stress.

Fig. 4 Dependence of the time-strain relationship on loading conditions for $M\gamma R_0^{-2}t_{1.5}=3.080$.

アスペクト比の増加が応力指数に及ぼす影響は Fig. 5(b) に示す。Fig. 5(b) は一定応力の条件で行った複数のシミュレーションから, 同じ粒径の時の歪み速度を応力に対してプロットしたものである。変形の初期, 粒径が等軸の場合 ($R/R_0=1$) の応力指数は 1 であるが, 変形によりアスペクト比が増加すると応力指数は減少する。このような式(6)からの離脱の程度は, 基準とする粒径 (R/R_0) が大きくなるほど増加する。以上の結果は, 実験により正しい応力指数を求めようとする際には, アスペクト比の変化に対する考慮も重要

Fig. 5 Influence of grain elongation on the relationship (a) between strain rate and grain size, and (b) between strain rate and stress.

であることを示している。

4. 結 論

粒界拡散機構による多結晶体の超塑性変形挙動を、静的および動的粒成長機構を組み入れて2次元シミュレーションし、変形中に起きる微視組織変化と力学的性質間の関係を調べた。大変形を可能とするため、粒界は直線とし粒界上における応力と flux は一定であるとの仮定を用いたが、等軸結晶粒に対して得られた歪み速度は他モデルからの予測と大体一致した。本研究では、特に力学的挙動に及ぼすアスペクト比の影響を中心に調べたが、アスペクト比が変化しない場合は応力指数と粒径指数が各々1と3であるのに対して、アスペクト比の変化が生じると応力指数は減少し粒径指数は増加することが分かった。また、アスペクト比の変化は粒界のモビリティに大きく左右され、高粒界モビリティの場合はアスペクト比の増加が抑制されることも分かった。本研究は粒界拡散と粒界すべりがペアで起きるとの Lifshitz 粒界すべり機構に基づいているが、シミュレーションより得られた微視組織に対する観察からは、粒界すべりは粒成長すなわち粒界移動と深く関係しているとの結論が得られた。

文 献

- 1) I. M. Lifshitz: Soviet Phys. JETP, **17**(1963), 909-920.
- 2) C. Herring: J. Appl. Phys., **21**(1950), 437-445.
- 3) R. L. Coble: J. Appl. Phys., **34**(1963), 1679-1682.
- 4) 金 炳男, 岸 輝雄: 日本金属学会誌, **61**(1997), 1341-1346.
- 5) B.-N. Kim, K. Hiraga, Y. Sakka and B.-W. Ahn: Acta Mater., **41**(1999), 3433-3439.
- 6) R. N. Stevens: Phil. Mag., **23**(1971), 265-283.
- 7) H. W. Green II: J. Appl. Phys., **41**(1970), 3899-3902.
- 8) R. Raj and M. F. Ashby: Metall. Trans., **2**(1971), 1113-1127.
- 9) M. F. Ashby and R. A. Verrall: Acta Metall., **21**(1973), 149-163.
- 10) M. F. Ashby, G. H. Edward, J. Davenport and R. A. Verrall: Acta Metall., **26**(1978), 1379-1388.
- 11) J. R. Spingarn and W. D. Nix: Acta Metall., **26**(1978), 1389-1398.