環境温度変化を考慮した 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

A Simulation for Dynamic Recrystallization Based on Multi-phase-field and
Dislocation-crystal Plasticity Theories Considering Change of Environmental Temperature

○ 谷本遼・慶大[学]
Ryo TANIMOTO,
Department of Mechanical Engineering,
Keio University,
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama

御園生大介・慶大[院]
Daisuke MISONO,
Graduate School, Keio University

正 志澤一之・慶大
Kazuyuki SHIZAWA,
Department of Mechanical Engineering,
Keio University

Key Words: Phase Transformation, Dislocation, Recrystallization, Hot Rolling, Phase-field Model

1. 緒 言

構造材料の熱間圧延においては動的再結晶現象が進行することが知られている。従来、動的再結晶に対して、粒成長、結晶変形および転位蓄積を同時に考慮した数値解析例は存在しない。著者らはこれまでに、Multi-phase-field モデルと転位-結晶塑性モデルとを転位密度を介して連成させた動的再結晶モデルを構築し、易動度をはじめとする諸物性値の環境温度依存性を導入した⁽¹⁾。しかしながら、いまだ温度変化が考慮されていない物性値が存在している。

そこで本研究では、参照ひずみ速度および臨界核半径を温度依存形に拡張することで、環境温度の変化に対応した温度依存形の動的再結晶モデルを精密化する。さらに、得られたモデルを用いて Multiphysics 解析を行い、応力-ひずみ曲線の温度およびひずみ速度に対する応答について検討する。

2. 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 $\phi^\alpha (0 \leq \phi^\alpha \leq 1)$ とすれば、任意の点において

$$\sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha = 1 \quad (1)$$

が成り立つ。このとき、 ϕ^α についての時間発展式および $\psi^{\alpha\beta} \equiv \phi^\alpha - \phi^\beta$ のように定義される Interface field を考慮すれば、Phase-field 方程式が次のように得られる⁽²⁾。

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

ここで、 $M_{\phi}^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間の易動度である。

一方、Bulkの自由エネルギーには転位の蓄積エネルギーを駆動力とした二重井戸形ポテンシャルとして、

$$f(\phi^\alpha, \phi^\beta) = E_s^{\alpha\beta} \left(\frac{2}{e} \phi^\alpha e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} - \frac{2}{e} e^{\phi^\alpha} e^{\phi^\beta} + 3 \right) \phi^{\beta^2} + W^{\alpha\beta} \phi^{\alpha^2} \phi^{\beta^2} \quad (3)$$

を用いる。ここで、 $E_s^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間の転位の蓄積エネルギー差、 $W^{\alpha\beta}$ は相 α - β 間のエネルギー障壁である。また、温度依存形のMulti-phase-field方程式の易動度は、

$$M_{\phi}^{\alpha\beta} = M_0 \frac{\sqrt{2W^{\alpha\beta}}}{6\alpha^{\alpha\beta}} \exp\left(-\frac{Q'}{kT}\right) \quad (4)$$

のように表わされる⁽¹⁾。ただし、 M_0 、 Q' および k_B は、それぞれ参照易動度、活性化エネルギーおよび Boltzmann 定数である。

3. 転位-結晶塑性モデル

結晶塑性論における硬化則には、

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0^{(k)} \operatorname{sgn}(\tau^{(k)}) \left| (\tau^{(k)} / g^{(k)}) \right|^{1/m} \quad (5)$$

のようなPan-Rice形のすべり速度硬化則を用いる。ここで、式(4)のひずみ速度感度指数 m は定数 w を用いて

$$m = wT \quad (6)$$

のように表される⁽¹⁾。また、 $\dot{\gamma}_0^{(k)}$ は参照ひずみ速度であり、次のように温度依存形に拡張する⁽³⁾。

$$\dot{\gamma}_0^{(k)} = \frac{A\mu b}{kT} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (7)$$

ただし、 A 、 μ 、 b 、 Q および R は、それぞれ数値定数、横弾性係数、Burgersベクトルの大きさ、自己拡散の活性化エネルギーおよび気体定数を表す。

一方、FCC結晶の多重すべり系を想定し、流れ応力には次の修正Bailey-Hirshの式を用いる。

$$g^{(k)} = \tau_r^{(k)} + \sum_{\beta} \Omega^{(k\lambda)} a\mu b \sqrt{\rho^{(\lambda)}} \quad (8)$$

ここで、式(8)の右辺第1項の格子摩擦応力 $\tau_r^{(k)}$ には次のような温度およびひずみ速度依存形のものを用いる⁽¹⁾。

$$\tau_r^{(k)} = \tau_i + \tau_0 \left[1 + \frac{kTN_A}{H_0} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0}\right) \right]^2 \quad (9)$$

ただし、 τ_i 、 τ_0 、 N_A 、 H_0 および $\dot{\epsilon}_0$ は、それぞれ非熱的応力、絶対零度の有効応力、アボガドロ数、最大応力の活性化エネルギーおよび参照ひずみ速度を表す。また、流れ応力 $g^{(k)}$ の発展式および転位密度に依存する硬化係数 $h^{(k\lambda)}$ はそれぞれ、

$$\dot{g}^{(k)} = \sum_{\lambda} h^{(k\lambda)} \left| \dot{\gamma}^{(\lambda)} \right|, h^{(k\lambda)} = \frac{1}{2} \frac{ac\mu\Omega^{(k\lambda)}}{L^{(\lambda)} \sqrt{\rho^{(\lambda)}}} \quad (10)$$

と表される。ここで、 $L^{(\lambda)}$ は転位の平均飛行距離である。転位密度の定義には、次のような全転位密度を採用する⁽⁴⁾。

$$\rho^{(k)} = \rho_0^{(k)} + \rho_G^{(k)} + \rho_\eta^{(k)} - \rho_R^{(k)} \quad (11)$$

4. 核生成モデル

核生成の判定条件は、臨界転位密度 ρ_c および臨界核半径 r_c を用いて以下のように与える。まず ρ_c に達した有限要素

の積分点を再結晶候補の中心とする。その積分点から半径 r_c 内の転位密度の平均値が ρ_c の130%を超えていれば、その領域を再結晶核とする。このとき、再結晶核内では転位密度およびすべり値を初期化し、結晶方位は隣接する核が大角化するようにランダムに値を与える。ここで、 ρ_c には次式のような温度依存形臨界転位密度モデルを用いる⁽¹⁾。

$$\rho_c = \rho_{c0} \left(\frac{\dot{\epsilon}}{\mu M_{\phi}^{\alpha\beta}} \right)^{1/3} \quad (12)$$

一方、臨界核半径は次の式で表わされる。

$$r_c = 2\sigma / E_s \quad (13)$$

ただし、 σ は粒界エネルギーであり、大角粒界においては0.5 J程度の値をとる。また、動的再結晶現象においては核生成の駆動力が非常に小さく、臨界核半径が非常に大きくなるため、 E_s の値を実際の4倍にすることで核サイズを調整する。式(13)の転位の蓄積エネルギー E_s は

$$E_s = \rho \mu b^2 / 2 \quad (14)$$

と表わされ、 ρ に臨界転位密度として式(12)を用いることで臨界核半径の温度依存性を表現する。

5. 計算スキーム

転位-結晶塑性モデルとMulti-phase-fieldモデルとを連成することで動的再結晶解析を行う。まず、転位-結晶塑性有限要素法により変形解析を実施する。その結果、粒界近傍などに高転位密度サイトが発現し、核生成モデルによって再結晶核が配置される。配置された再結晶核に対し、変形解析により得られた転位密度の情報を用いてPhase-field解析を行えば、再結晶核の成長に伴う秩序変数変化の情報が見られる。このとき、たとえば相 α の領域において $\phi^{\beta} \geq 0.7$ に変化した領域では相 β へ相変化したとみなし、転位密度を更新し、すべり値を初期化する。さらに、更新された転位密度を用いて再度変形解析を行う。以上の操作をステップ毎に繰り返す。

6. シミュレーション結果および検討

6.1 動的再結晶解析における解析モデル 初期状態は粒数3のTricrystalを配置し、粗大粒を模擬している。各粒における初期結晶方位はそれぞれ10, 35, および75°を与える。初期の解析領域を40 μm ×40 μm のアルミニウム平板とし、Asaroの平面2重すべりモデルを採用する。上下から力学的拘束を加え、単純せん断変形を想定して強制変位を与える。また、FDM解析における解析領域の分割数およびFEM解析における要素数はそれぞれ201×201および9216である。

6.2 シミュレーション結果 環境温度および印加ひずみ速度の解析条件をそれぞれ変えた場合において、再結晶核が初めて生成した際の結晶方位および転位密度分布図を図1、 $\dot{\epsilon} = 0.001\text{s}^{-1}$ および $\dot{\epsilon} = 0.1\text{s}^{-1}$ における公称応力-公称ひずみ曲線をそれぞれ図2および図3に示す。

まず、図1の(i)および(ii)は印加ひずみ速度が0.001 s^{-1} 、環境温度がそれぞれ500Kおよび800Kにおける解析結果である。双方を比較すると、500Kに比べて800Kにおける再結晶核の半径が大きくなっているということが確認できる。このことから、温度が大きくなることで臨界核半径も大きくなるということがわかる。また、図1の(iii)および(iv)は印加ひずみ速度が0.1 s^{-1} 、温度がそれぞれ500Kおよび800Kにおける解析結果である。こちらも先ほどと同様、500Kに比べて800Kにおける再結晶核の半径が大きくなっているため、臨界核半径の温度依存性を確認することができる。また、図1の(i)および(ii)に比べて図1の(iii)および(iv)における再結晶核の半径が小さくなっているということから、臨界核半

Fig. 1 Crystal orientation and dislocation density at first nucleation (Analysis temperature and strain rate: (i) 500K, 0.001 s^{-1} , (ii) 800K, 0.001 s^{-1} , (iii) 500K, 0.1 s^{-1} , (iv) 800K, 0.1 s^{-1})

Fig. 2 Stress-strain curve at $\dot{\epsilon} = 0.001\text{s}^{-1}$

Fig. 3 Stress-strain curve at $\dot{\epsilon} = 0.1\text{s}^{-1}$

径はひずみ速度にも依存し、ひずみ速度が大きくなるほど臨界核半径は小さくなるということがわかる。

続いて図2では、800Kにおいて応力-ひずみ曲線が途中で大きく軟化している様子が確認できる。これは解析領域に対して再結晶核の半径が大きく、多くの転位密度が瞬間的に減少したためである。また、500Kにおいて応力-ひずみ曲線の硬化と軟化の繰り返しが多く見られる。これは再結晶核が数多く生成されたということを示しており、核生成条件における臨界核半径が小さいため、再結晶核が生成しやすいことによる。しかしながら初めて核生成した変形量は500Kと800Kとで同程度であり、温度を低くすることで臨界核半径は小さくなるが、臨界転位密度は大きくなるということに起因している。

図3においては、800Kの応力-ひずみ曲線で硬化と軟化の繰り返しが多く見られる。これはひずみ速度を大きくしたことにより、図2の800Kの場合に比べて臨界核半径が小さくなったためである。また、500Kにおいては臨界核半径が小さいにもかかわらず、ほとんど再結晶核が生成されていないことが確認できる。これは温度を低くし、ひずみ速度を大きくすることで臨界転位密度が非常に大きくなったためである。以上のことから、臨界核半径が小さくなる条件においては臨界転位密度が大きくなるという関係がわかる。

7. 結 言

参照ひずみ速度および臨界核半径を温度依存形に拡張した動的再結晶Multiphysicsモデルを用いて数値解析すれば、環境温度および印加ひずみ速度の解析条件を変えることで、生成される再結晶核の大きさが変化する様子を再現することができる。また、それに応じて応力-ひずみ曲線における硬化と軟化の傾向が異なる様子を再現できる。

文 献

- (1) 御園生大介, 長津輝, 志澤一之, 日本材料学会第62期学術講演会講演論文集, (2013), pp.425.
- (2) Steinbach, I., et al., *Physica D*, **134** (1999), pp.385-393.
- (3) Walser, B., and Sherby, O.D., *Scr Metall*, **16** (1982), pp.213-219.
- (4) Aoyagi, A and Shizawa, K., *Int. J. Plasticity*, **23-6** (2007), pp.1022-1040.