510 ねじれ・くさび回位型変形場を有する結晶モデルの多重すべり変形と再結晶粒成長の検討 Multiple slip deformation and generation of recrystallization nuclei in crystal models with deformation field of wedge and twist-type disclinations

正 大橋 鉄也 (北見工大) ○学 島津 侑宜 (北見工大院)

Tetsuya OHASHI, Kitami Institute of Technology
Yuki SHIMAZU, Graduate Student, Kitami Institute of Technology

金属材料の塑性変形は、結晶粒に生じるすべり変形や双晶変形などの組み合わせであり、金属多結晶では粒界を通した変形拘束の相互作用が生じる。この結果、粒界近傍には不均一な変形が生じ、それに伴うひずみ勾配に応じて幾何学的に必要な転位(以後 GN 転位と略する)が蓄積する。金属微視組織中に蓄積する GN 転位は再結晶核の発生に重要な役割を果たしていると考えられている。現象論的には、再結晶核は結晶粒界の近傍やとくに結晶粒界の3重線や4重点の近傍に多数形成されることが知られており、再結晶開始前の微視組織の平均粒径も、再結晶組織に大きな影響を及ぼすことが良く知られている。これまで我々は、寸法の異なる粒界3重線モデルを作成し、GN 転位の蓄積箇所や再結晶核発生箇所を検討した。本研究ではくさび回位型及びねじれ回位型変形場を持ち、モデル寸法が異なる3重結晶モデルを用いて、GN 転位のデータに基づいて再結晶核を発生させて、その分布の特長について検討するとともに、再結晶核の成長の初期段階に関する Monte Carlo(以後 MC と略する)シミュレーション⁽¹⁾を行う。

2. 解析モデルと解析方法

くさび回位型及びねじれ回位型変形場を持つ三重結晶モデルを Fig. 1 に示す。以降 Fig. 1(a) のモデルを $W_{\text{large-model}}$ 、(b) のモデルを $T_{\text{large-model}}$ と呼ぶ。これらモデルに含まれる3つの結晶粒における主すべり系すべり面の配置も Fig. 1 に示した。図に示されているように、すべり面法線方向ベクトルの z 方向成分が 0 になるように結晶方位を選択した。また、これらのすべり系のすべり方向ベクトルも z 成分が 0 となるように決定した。すべり面法線方向と y 軸とのなす角、すべり方向ベクトル b 、すべり面法線ベクトル v の x 、 y 成分の値および、次式で与えられるシュミットテンソル

$$P_{ij} = \frac{1}{2}(bv_j + v_jb_i) \quad (1)$$

は、結晶粒1と2では $P_{12}|_{\text{Grain-1}} = -P_{12}|_{\text{Grain-2}} \neq 0$ であるので、結晶粒3による拘束がなければ、このすべり系が活動すると x - y - z 座標系に関するせん断ひずみも $\varepsilon_{xy}|_{\text{Grain-1}} = -\varepsilon_{xy}|_{\text{Grain-2}} \neq 0$ となる。結晶粒3の結晶方位は結晶粒1の結晶を y 軸で 180° 回転させたものを選んだ。Fig. 1(a) の $W_{\text{large-model}}$ では、結晶粒1、2を y 軸方向に重ね、結晶粒3を (z 軸方向から見て) これの左に隣接するように配した。この時、粒界3重線を中心としたくさび回位型の変形場が形成される⁽²⁾。一方 Fig. 1(b) の $T_{\text{large-model}}$ では、結晶粒3を結晶粒1、2の手前に隣接するように配した。このとき、3つの結晶粒の主すべり系が活動すると、粒界3重線を中心としたねじれ回位型の変形場が形成される⁽²⁾。この2

種類の3重結晶の塑性変形を結晶塑性解析プログラム CLP⁽³⁾⁽⁴⁾ を用いて解析する。本研究では $W_{\text{large-model}}$ 及び $T_{\text{large-model}}$ の寸法を $200 \times 200 \times 100 [\mu\text{m}]$ 、 $100 \times 200 \times 200 [\mu\text{m}]$ とし、Fig. 1 に示した2つのモデル寸法を $1/10$ の $20 \times 20 \times 10 [\mu\text{m}]$ と $10 \times 20 \times 20 [\mu\text{m}]$ に縮小した $W_{\text{small-model}}$ 、 $T_{\text{small-model}}$ も作成した。各モデルとも2048の有限要素に分割し、材料は弾性異方性を無視できるもの(弾性コンプライアンス $[\text{m}^2/\text{N}]$: $S_{11}=1 \times 10^{-11}$ 、 $S_{22}=-0.25 \times 10^{-11}$ 、 $S_{44}=2.5 \times 10^{-11}$) を用いた。また、両モデル上下端面に均一に分布する圧縮負荷を与え、ひずみが20%まで解析を行った。

Fig. 1 (a) $W_{\text{large-model}}$ used in this study. Slip planes of the primary slip systems in each crystal grain are shown.

(b) $T_{\text{large-model}}$ used in this study. Slip planes of the primary slip systems in each crystal grain are shown.

いくつかの実験結果は多重すべりの程度が再結晶核の発生に関与していることを示唆している。このことは、多重すべりが生じると異なるすべり系のGN転位が切り合い、絡み合うために、材料中に容易に散逸しない形でエネルギーが蓄積し、それが再結晶核の発生に寄与するためであると考えられることができる。また、再結晶核と母相との界面が安定に存在するために、複数のすべり系上のGN転位群がなければならぬとする考え方もある⁽⁵⁾。我々はそれぞれのすべり系に蓄積したGN転位の量および、複数のすべり系上のGN転位の重ね合わせの強さを表す指標として、次の3つの量 $\tilde{I}_1$ 、 $\tilde{I}_2$ 、 $\tilde{I}_3$ について検討してきた⁽⁶⁾。

$$\tilde{I}_1 = \frac{\sum_i \|\rho_G^{(i)}\|}{\sum_i \rho_S^{(i)}|_0} \quad (2)$$

$$\tilde{I}_2 = \frac{\sum_i \sum_j \omega_2^{(ij)} \|\rho_G^{(i)}\| \times \|\rho_G^{(j)}\|}{\sum_i \sum_j \omega_2^{(ij)} \rho_S^{(i)}|_0 \times \rho_S^{(j)}|_0} \quad (3)$$

$$\tilde{I}_3 = \frac{\sum_i \sum_j \sum_k \omega_3^{(ijk)} \|\rho_G^{(i)}\| \times \|\rho_G^{(j)}\| \times \|\rho_G^{(k)}\|}{\sum_i \sum_j \sum_k \omega_3^{(ijk)} \rho_S^{(i)}|_0 \times \rho_S^{(j)}|_0 \times \rho_S^{(k)}|_0} \quad (4)$$

ここで $\|\rho_G^{(i)}\|$ はすべり系 i のGN転位密度のノルムの値、

$\rho_s^{(i)}|_0$ はすべり系*i*の初期転位密度 $\omega_2^{(ij)}$, $\omega_3^{(ik)}$ はすべり系の組み合わせによって値が変わる重み係数である⁽⁶⁾.

結晶塑性解析の結果から得られた $\tilde{I}_1$, $\tilde{I}_2$, または $\tilde{I}_3$ の値が閾値より大きな箇所に再結晶核を発生させることにする. この時, 再結晶核半径は $\tilde{I}_1$, $\tilde{I}_2$, または $\tilde{I}_3$ の値に比例するものとした. 再結晶粒成長のMCシミュレーションでは, Fig. 1のモデルを87808個のセルに分割した.

3. 結果と考察

Fig. 2, 3は W_{large} -modelおよび W_{small} -modelについて再結晶核発生の閾値を $\tilde{I}_i > 0.2$ ($i=1, 2$ or 3) としたときの再結晶核の分布である. $\tilde{I}_1 > 0.2$ を再結晶核の発生条件とした場合には初期結晶粒径の大きさが違っていても, 核発生のしかたに違いが見られないが, 多重すべりが核発生に必要なと考えた条件, すなわち $\tilde{I}_2 > 0.2$ または $\tilde{I}_3 > 0.2$ を核発生条件とすると, 再結晶前の結晶粒の寸法 (初期結晶粒径) が小さな方が多くの核が発生することがわかる.

Fig. 4, 5は再結晶核の発生条件を $\tilde{I}_i > 3$ ($i=1, 2$ or 3) としたときの, T_{large} -modelおよび T_{small} -modelにおける再結晶核の分布である. T_{large} -modelでは粒界3重線近傍にごく少数の再結晶核が発生したが, T_{small} -modelでは $\tilde{I}_1$, $\tilde{I}_2$, $\tilde{I}_3$ のどの指標を用いてもモデルの広い範囲にわたって再結晶核が発生した. これは T_{small} -modelと T_{large} -modelでGN転位の蓄積量に大きな差があるためであり, 初期結晶粒径が影響している.

全てのモデルで再結晶核粒径は粒界3重線近傍では大きく, 粒界3重線から離れるにつれ粒径が小さくなった. これは粒界3重線近傍のひずみエネルギーの蓄積量が多いためである.

Fig. 6(a), (b)は, T_{large} -model及び T_{small} -modelについて $\tilde{I}_3 > 3$ を再結晶核発生条件とし, そこからの成長に関して100ステップのモンテカルロシミュレーションを行なった結果である. T_{large} -modelでは粒界3重線近傍から少数の大きな再結晶粒が成長している一方, T_{small} -modelでは多数の小さな再結晶粒が一度に形成されてモデル下方の部分埋め尽くしている. 再結晶粒の成長は結晶粒界や粒界3重線近傍から始まることや, 初期結晶粒径が小さな場合には再結晶核の発生は粒界近傍に限らないことなどが知られており, 本研究ではこれらの実験的な知見を数値的に再現することが出来た.

Fig. 2 Generation of recrystallization nuclei in W_{large} -model.

Fig. 3 Generation of recrystallization nuclei in W_{small} -model.

Fig. 4 Generation of recrystallization nuclei in T_{large} -model.

Fig. 5 Generation of recrystallization nuclei in T_{small} -model.

Fig. 6 Monte Carlo simulation results of recrystallization in (a) T_{large} -model and in (b) T_{small} -model.

4. 結 言

くさび回位型及びねじれ回位型変形場を持ち, モデル寸法が異なる4種類の3重結晶モデルを用いて, GN転位の蓄積を求め, そのデータに基づいて発生させた再結晶核の分布とその成長について検討した. その結果, 再結晶現象の特徴として報告されているいくつかの事柄を数値的に再現することができた.

5. 参考文献

- (1) 齊藤 良行, 組織形成と拡散方程式, コロナ社, p118-124
- (2) Ohashi, T, Sato, M, and Shimazu, Y, Materials Science Forum Vols. 654-656, 2010, p1283-1286
- (3) Ohashi, T, 1994, Phil. Mag., A70, 793
- (4) Ohashi, T, 1997, Phil. Mag., Lett., 75, 51
- (5) M. Tagami, K. Kashiara, T. Okada and F. Inoko, J. Japan Inst. Metals 41(2000) 535-542
- (6) 大橋, 栗原, 2008年度, 計算力学講演会論文集, P395-396