

内受21-32

早稲田大学大学院理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

Phase-field 法による組織形成の
計算機シミュレーション
(Numerical simulation of microstructural
evolutions with use of Phase-field method)

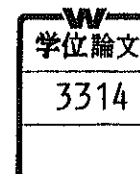
申 請 者

諏訪 嘉宏

Yoshihiro Suwa

資源及材料工学 材料組織形成学

2001年2月



理 2671 (3314)

近年、計算機の処理能力拡大に伴い、材料の組織形成過程に対する動力学シミュレーションが非常に容易になりつつある。材料の組織形成過程を計算しようとする場合、重要な点は、基本的に非線形現象を相手にしているという認識である。電磁気学や量子力学の世界は、それ自身がいわば揺らぎの小さな世界であるので、マックスウェルの方程式やシュレーディンガーの波動方程式を厳密に解析することによって、高精度の自然現象の予測が可能である。一方、金属の相変態現象の世界は、例えば非線形拡散方程式を正確に解析したとしても、境界条件や初期条件の若干の差によって結果が大きく変化し得る。いわば非線形性が現象の大半を支配する揺らぎの大きな世界である。したがって、前者における計算機シミュレーションは、計算の厳密性・正確性が重要であり、後者では、厳密性・正確性を出来得る限り維持しつつ、かつ計算機実験における試行錯誤の容易さが要求される。つまり相変態の計算では、厳密な相変態予測は原理的に困難であるという認識の下に、設計シミュレーション（試行錯誤しながら目的とする組織・構造を探索していくシミュレーション）としての計算機実験法の確立が大切と考えられる。本論文で扱う Phase-field 法は、このような計算を非常に効率よく行うことが出来る手法と考えられる。本論文では、Phase-field 法を相分離挙動及び結晶粒成長への適用した結果について説明する。

第一章において本論文の目的、構成について説明した。

第二章において、組織形成過程に関わる理論で特に本論文で扱うシミュレーションに関連が深い内容、結晶粒成長及び相分離過程について解説した。また、Onsager の非平衡熱力学の基礎について説明し、そこから導き出される局所平衡の仮定を導入することにより、部分系内での熱力学的な諸量を定義した。この諸量において、特に局所秩序変数(local order parameter)の時空間的な分布と自由エネルギー汎関数に注目し、さらに粗視化の概念を用いることにより導き出される連続体モデルについて解説し、このモデルを用いて組織形成過程の

解析を行い、Phase-field 法の理論背景について解説した。また、これまで用いられたさまざまな、組織形成過程のシミュレーション方法について概説し、しかる後に Phase-field 法について解説している。Phase-field 法について以下に概説する

Phase-field 法とは界面が有限な厚さを持つとして、連続的な秩序変数によりエネルギー汎関数を求め、各秩序変数の時間発展を求める方法であり、系の時間発展を記述する秩序変数が、時空間における相の場、すなわち Phase-field となる。

組織の時間発展を記述する基本方程式は、保存場（例えば濃度）および非保存場（例えば結晶方位）について以下のように表される。

$$\text{保存場} : \frac{\partial c_i(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M(c_i(\vec{x}, t), T) \nabla \left(\frac{\delta F_{\text{system}}}{\delta c_i} \right) \right] \quad (1)$$

$$\text{非保存場} : \frac{\partial \eta_i(\vec{x}, t)}{\partial t} = -L(\eta_i(\vec{x}, t), T) \left(\frac{\delta F_{\text{system}}}{\delta \eta_i} \right) \quad (2)$$

ここで $c_i(\vec{x}, t)$ と $\eta_i(\vec{x}, t)$ はそれぞれ位置 \vec{x} 、時間 t における保存系及び非保存系の秩序変数である。 $M(c_i(\vec{x}, t), T)$ と $L(\eta_i(\vec{x}, t), T)$ は保存場及び非保存場の秩序変数の易動度で、秩序変数と温度 T の関数である。 F_{system} は系全体の自由エネルギー汎関数である。化学自由エネルギー F_{chem} 、界面エネルギー F_{int} のほかに弾性ひずみエネルギーの和で表されるが、本論文においては弾性ひずみエネルギーは考慮していない。

$$F_{\text{system}} = \int (F_{\text{chem}}(c_i(\vec{x}, t), \eta(\vec{x}, t), T) + F_{\text{int}}(c_i(\vec{x}, t), \eta_i(\vec{x}, t), T)) d\vec{x} \quad (3)$$

式(3)を式(1)及び式(2)に代入すれば、Cahn-Hilliard 方程式及び Allen-Cahn の式が得られ、それぞれの式の数値解を求めることにより、スピノード分解と結晶粒成長のシミュレーションが可能となる。

第三章においては秩序変数が保存場である場合の、Phase-field 法の代表的アプリケーションである、Cahn-Hilliard 方程式を用いた相分離挙動についてシミュレーションを行い、特に相分離後期過程に着目して解析を行ったところ、平均粒径の時間に対する $1/3$ 乗依存則が得られ、さらに、LSW 理論により得られた析出相の粒径分布関数に対してシミュレーションで得られた結果は良く一致した。また、相分離挙動に対する時効時間の影響についてもシミュレーションを行い、このシミュレーションの条件下においては、初期の時効温度に関係なく、最終的な時効温度により組織は決定することを示した。さらに、第二添加元素の相分離挙動に対する影響についても考察し、添加元素により相分離挙動が加速されることを示した。

第四章においては秩序変数が非保存場である場合のアプリケーションとして結晶粒成長についてシミュレーションを行い、平均粒径の時間に対する $1/2$ 乗依存則が得られた。これは古典論と一致する。さらに、辺数分布及び粒径分布は一定の形状に漸近していくという結果が得られた。また、界面移動速度と界面エネルギーの関係について考察したところ、界面移動速度は界面エネルギーに比例するという結果が得られた。これは、平均場理論により得られた結果と一致する。

第五章では総括とし、第二章から第四章までの成果をまとめて述べている。