



ここまで来た計算科学の鉄鋼への応用

Phase-field法を用いた材料組織形成のモデル化

Modeling of Phase Transformations and Microstructure Evolutions Using Phase-Field Method

小山敏幸
Toshiyuki Koyama

独立行政法人 物質・材料研究機構
計算材料科学研究センター 主任研究員

1 はじめに

近年、材料のナノからマイクロスケールにおける複雑な内部組織形成のシミュレーション手法として、Phase-field法¹⁻¹³⁾と呼ばれる方法が大きな進展を見せている。本稿では特に、鉄鋼材料に対するこの計算手法の最近の進展の代表例として、「Fe-C系におけるデンドライト組織形成¹⁴⁾」および「Fe-C系におけるオーステナイト相からフェライト相の析出過程¹⁵⁾」を取り上げ紹介したい。以下ではまず始めに凝固におけるPhase-field法を例に取り、計算手法の基礎について説明し、その後、上記の組織形成について解説する。なおPhase-field法全体の説明については、近年、本誌も含めていくつかの解説¹⁻¹³⁾が出ているのでそちらを参照されたい。

2 凝固におけるPhase-field法の基礎

凝固におけるPhase-field法を例に取り計算手法の一連の流れを説明する⁵⁾。凝固のPhase-field法では、液相と固相の界面を図1のように0から1に変化するスカラー連続関数

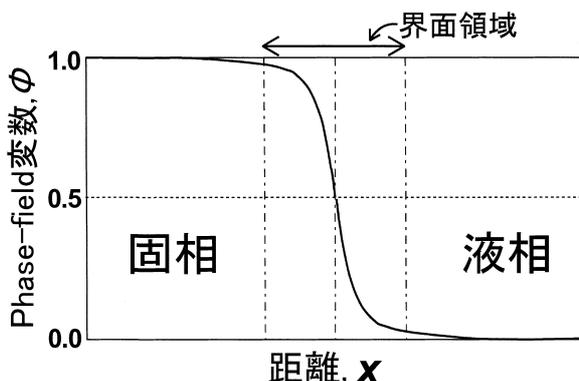


図1 界面位置におけるPhase-field プロファイル

ϕ (Phase-field変数と呼ばれる)を用いて表現し、凝固における結晶成長過程を ϕ の時間および空間変化として表現する。したがって ϕ は時間 t と位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ の関数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ である。物理的には、 $\phi(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} 及び時間 t における固相の存在確率と解釈できる。この計算法の有益な点は、場の変数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ を用いることによって、デンドライトのような複雑な固液界面形状を容易に表現することができる点にある。また界面の曲率、溶質分配および温度分布などの条件は、界面物性値から求まるパラメータを採用することによって自動的に満足されるので、この計算法は自由度に富み、かつ応用性の高い数値計算法となっている。次に系の全自由エネルギーおよび発展方程式について説明する。

凝固組織全体を1つの系として、この系の全自由エネルギー F は、局所的な自由エネルギー密度を体積積分して、

$$F = \int_V \left\{ f(\phi, c, T) + \frac{1}{2} \epsilon^2 |\nabla\phi|^2 \right\} dV \quad \dots\dots\dots (1)$$

にて表現される。 $f(\phi, c, T)$ は平均場近似の化学的自由エネルギーで、Phase-field法では、通常、

$$f(\phi, c, T) \equiv h(\phi)f^S(c, T) + \{1-h(\phi)\}f^L(c, T) + W^{SL}g(\phi) \quad \dots\dots\dots (2)$$

にて定義される。 $f^S(c, T)$ および $f^L(c, T)$ はそれぞれ固相および液相の化学的自由エネルギーで、組成 c (例えばFe-C2元系では炭素Cの濃度)および温度 T の関数として与えられる(c と T も場の変数で、位置 \mathbf{r} および時間 t の関数である点に注意)。 $h(\phi)$ は局所的な固相率に対応した単調増加関数で、 $h(0) = 0$ および $h(1) = 1$ を満たす。 $W^{SL}g(\phi)$ は固相と液相が混合しないように導入されたエネルギー障壁で、 $0 < \phi < 1$ の範囲で極大値を取る関数であり、 $\phi = 0$ および $\phi = 1$ で0と置かれる。 $h(\phi)$ と $g(\phi)$ の関数形としては、

$$h(\phi) \equiv \phi^3(15 - 10\phi + 6\phi^2), \quad g(\phi) \equiv \phi^2(1 - \phi)^2 \dots\dots\dots(3)$$

が使用される場合が多い。式(1)の積分内の第2項は勾配エネルギーと呼ばれ、単相状態に界面を導入したときの自由エネルギーの変動量で、物理的には界面エネルギーに対応する項である(界面エネルギーには界面領域(図1参照)における平均場の化学的自由エネルギーも含まれるので、正確には勾配エネルギーと界面エネルギーは一致するものではない点を記しておく)。 ϵ^2 は勾配エネルギー係数である。特に界面エネルギーに方位 θ 依存性を考慮する場合、その効果は ϵ の方位依存性として導入され、2次元計算では関数形として主に、

$$\epsilon(\theta) \equiv \epsilon_0 \{1 + v \cos(k\theta)\} \dots\dots\dots(4)$$

が使用される。 ϵ_0 は定数、 v は界面エネルギー異方性の大きさを表し、 k は θ 方向の界面エネルギーの周期を表す(たとえば2次元シミュレーションで、結晶が立方晶であり、90°毎に界面エネルギーに極小が現れるような場合には $k=4$ となる)。2次元シミュレーションでは、 θ は界面の法線ベクトルの x 軸からの角度にて定義され、phase-field変数 ϕ の空間勾配を用いて、

$$\tan \theta = \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x}, \quad \theta = \tan^{-1} \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x} \dots\dots\dots(5)$$

にて計算される(2次元の直交座標系を (x, y) とする)。 v の値の設定については注意が必要で、 v が1/15を超える場合($v > 1/15$)、界面エネルギーが負となる θ の範囲($\epsilon + \partial^2 \epsilon / \partial \theta^2 < 0$ が成立する範囲)が出現してしまう。つまりこの範囲では安定な界面が存在し得ないことになり、したがって界面の平衡形状において、この θ 範囲の界面が現れず、界面方位が不連続に移り変わる部分が出る。このような場合、Phase-field法の数値計算に補正が必要となる。この補正計算の詳細はEgglestonらによってすでに提案されている¹⁶⁾。さらに最近では界面エネルギーだけでなく、速度定数(界面の易動度に対応する項)にも、方位依存性を考慮する試みがUeharaらによって進められている¹⁷⁾。

Phase-field法では、 ϕ の時間および空間発展は、系の全自由エネルギー F の ϕ による変分に比例すると仮定され、発展方程式として、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \dots\dots\dots(6)$$

が用いられる。 M_ϕ は界面の易動度である。この右辺の変分計算において、特に勾配エネルギー係数 ϵ^2 に方位依存性がある場合には注意が必要である。つまり式(5)より明らかなように、方位 θ がPhase-field変数 ϕ の空間勾配 $\nabla \phi$ の関数になっているので、変分計算において勾配エネルギー係数

$\epsilon^2(\theta)$ も変分する必要があるからである。ちなみに2次元シミュレーションの場合において、 $\delta F / \delta \phi$ を具体的に書き下すと、

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} + \frac{d}{dx} \left[\epsilon \epsilon' \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \epsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] - \frac{d}{dy} \left[\epsilon \epsilon' \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right]$$

となる。ここで $\epsilon' \equiv \partial \epsilon / \partial \theta$ および $\epsilon'' \equiv \partial^2 \epsilon / \partial \theta^2$ である。

また温度場 T の時間変化の計算には、熱拡散方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T - p(\phi) \frac{L}{C_p} \frac{\partial \phi}{\partial t} \dots\dots\dots(7)$$

が用いられる。右辺第2項は凝固潜熱による熱の湧き出し項で、 α は熱拡散係数、 L は潜熱、 C_p は単位体積当たりの比熱である。 $p(\phi)$ は $p(0) = p(1) = 0$ で、

$$\int_0^1 p(\phi) d\phi = 1$$

を満たす関数であり、関数 $h(\phi)$ を用いて $p(\phi) \equiv \partial h / \partial \phi$ と定義される場合が多い。濃度場の時間発展の計算に対しては、拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{D_c(\phi)}{f_{cc}} \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right) \dots\dots\dots(8)$$

が使用される。 $D_c(\phi)$ は液相と固相の溶質元素の相互拡散係数を ϕ で重み付き平均した量であり、 f_{cc} は式(2)の組成 c による2階微分である。凝固におけるPhase-field法は、式(6)~(8)を同時に数値計算して、凝固組織にけるphase-field変数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 、濃度場 $c(\mathbf{r}, t)$ 、および温度場 $T(\mathbf{r}, t)$ の時間変化を解析する手法である。

なお式(1)に濃度勾配エネルギー項が考慮されていない理由は、凝固のPhase-field法では通常、界面エネルギーは全てphase-field変数 ϕ の勾配エネルギーに繰り入れる近似がなされるからである。また以下に説明するKKSモデル¹⁸⁾のように濃度場を常に局所平衡と仮定した場合には、計算モデル上結果的に、空間的に急峻な濃度勾配がほとんど存在しないことになるので、濃度勾配エネルギーを考慮する必要がなくなる。実際にPhase-field法の計算モデルを作成して定量的な解析を行う際には、この当たりの仮定や設定条件を正確に理解しておくことが大切である。

さて通常、金属の凝固において、組織全体のサイズはマイクロメートルスケール程度であるが、固液界面幅は原子スケールの長さを持つ。差分法を用いて発展方程式を解く場合、この界面でのPhase-fieldプロファイルが十分に表現できるだけの差分の解像度が要求されるので、凝固組織全体の差分

分割数は極めて大きくなってしまふ。このような場合には数値計算のテクニックとして、差分分割数を組織内の場所によって変化させる方法(重なり格子法もしくは解適合格子法)¹⁹⁾の使用が考えられる。これに対し、Phase-field法では、粗い差分分割をそのまま用いて、かつ界面部分の正確な温度場やポテンシャル場(もしくは化学的自由エネルギー)を正しく計算する手法も考案されている。合金の凝固におけるこの計算法の代表例がKKSモデル(Thin interface modelとも呼ばれる)である¹⁸⁾。この計算法では、粗い差分分割から計算されるならかな $\phi(\mathbf{r}, t)$ と $c(\mathbf{r}, t)$ の関係式、および局所平衡の条件式、すなわち、

$$c(\mathbf{r}, t) = h\{\phi(\mathbf{r}, t)\}c_s(\mathbf{r}, t) + [1-h\{\phi(\mathbf{r}, t)\}]c_L(\mathbf{r}, t) \dots\dots\dots (9)$$

$$\mu^S\{c_s(\mathbf{r}, t)\} = \mu^L\{c_L(\mathbf{r}, t)\} \dots\dots\dots (10)$$

を用いて、まず c_s と c_L を決定する($c(\mathbf{r}, t)$ と $\phi(\mathbf{r}, t)$ が与えられた時に $c_s(\mathbf{r}, t)$ と $c_L(\mathbf{r}, t)$ が求まる)。 c_s と c_L はそれぞれ固相と液相の局所平衡濃度(ここでは式(10)の平行接線の法則を満足する濃度を意味しているので注意)である。 μ^S と μ^L はそれぞれ固相と液相の化学ポテンシャルである。この c_s と c_L を用いて、式(2)の化学的自由エネルギーを

$$f(\phi, c, T) \equiv h(\phi)f^S\{c_s(c, \phi), T\} + [1-h(\phi)]f^L\{c_L(c, \phi), T\} + W^{SL}g(\phi) \dots\dots\dots (11)$$

と変更することによって、濃度場は常に局所平衡の自由エネルギーを基礎に計算されることになる。つまり $c(\mathbf{r}, t)$ が界面において緩やかなプロファイルであっても、 $c_s(\mathbf{r}, t)$ と $c_L(\mathbf{r}, t)$ は界面においてシャープな界面を構成するので、界面における差分分割の粗さに起因する誤差が修正されるわけである。定式化の詳細についてはKimらの論文¹⁸⁾を参照されたい。なおこのような補正まで考慮した場合、Phase-field法は1原子面で構成されるシャープな界面にも定量的に適用できる方法になる。さらに最近Karma²⁰⁾によって、KKSモデルでは考慮されていなかった界面拡散や界面伸縮補正まで取り入れた解析も進められている。

以上が、合金の凝固におけるPhase-field法の基本的な内容である。以下では、Fe-C系における凝固組織形成のPhase-field法の代表例として、OdeとSuzukiの研究¹⁴⁾を紹介したい。もちろんここではKKSモデルが使用されている。

3 Fe-C系における凝固組織形成¹⁴⁾

OdeとSuzukiはFe-C系を例に、融液が鑄型で核形成・成長する初期凝固過程の組織形成のPhase-fieldシミュレーションを行った¹⁴⁾。図2はFe-0.5 mol% C合金における凝固初期のデンドライト成長過程の計算で、固相の優先成長方位が熱流の方向(横方向)と一致するように設定した場合の結果である。図(a)に示されるように、凝固初期に内部方向(図で左向き)と表面方向(図で下向き)に1次アームが成長する。融液表面(図の右端)が冷却され続けるために、後者の成長速度は前者に比べ大きい。2次アームについては、表面に沿った1次アームからの2次アームは著しく成長する(図(b))。さらにこの2次アームは競合成長するとともに、急速凝固試料でしばしば観察されるセル形態を取る(図(c))。その後、先行したセルが選択されて、側枝を生じデンドライト形態へと遷移する(図(d)-(f))。以上のように、Phase-field法に基づき、熱流下における凝固組織形成が精度良くシミュレーションされている。さらに論文では、この合金にPを添加した場合の凝固組織の変化や、熱流場とアームの優先成長方位との関係についても議論されている。

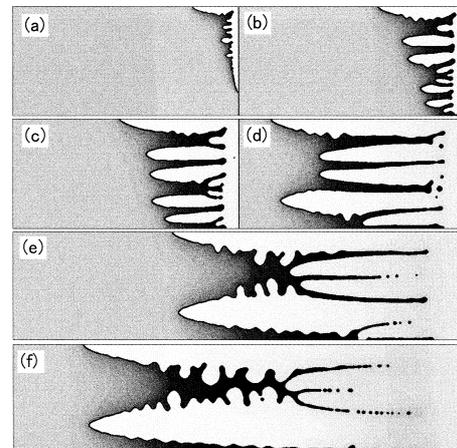


図2 Fe-0.5mol% C合金の初期凝固デンドライト成長¹⁴⁾
(a) 1.0 ms, (b) 3.0ms, (c) 5.0ms, (d) 10ms, (e) 17ms, (f) 24ms

4 Fe-C合金における γ 相から α 相の析出¹⁵⁾

ここでは最近Loginovaらによって提案された、Fe-C系におけるオーステナイト相(γ 相)からフェライト相(α 相)の析出のPhase-fieldシミュレーションを紹介したい¹⁵⁾。この計算では、 α 相の析出形態に関して、粒界アロトリオモルフ(allotriomorph)²¹⁾、ウィドマンステッテン(Widmanstätten)組織²¹⁾、およびマッシブ(massive)変態²¹⁾の

全てを1つのシミュレーションから統一的に計算でき、かつ使用している化学的自由エネルギーにCALPHAD法²²⁾における副格子モデル²²⁾を直接利用しているため、極めて実用的である。基本的な計算手法は、先の凝固におけるPhase-field法の計算式において、液相と固相をそれぞれ γ 相および α 相と置けば良い(なおLoginovaらはKKSモデルではなく、解適合格子法を採用している)。計算手法の詳細についてはLoginovaらの論文¹⁵⁾を参照していただくとして、以下では、この計算において展開されている従来のPhase-field法ではあまり考慮されていない新しい部分について若干詳しく説明する。

Fe-C系の固相では、炭素Cが結晶格子の侵入位置に入るので、Phase-field法にて濃度場を計算する場合、C濃度の取り扱いに注意を要する。注意点は、組織内の異なる局所領域(体積は同一とする)を考えた場合、その領域に含まれる原子数が異なる場合が発生する点である。例えば、いま置換型元素(Fe)の支配体積(1原子が占有する体積、モル体積でも良い)がbccとfccにおいても同じと仮定しよう(Loginovaらの論文でもこのように仮定されているが、正確にはphase-field変数 ϕ の関数と置くのが正しいだろう)。この場合、組織内の異なる局所領域(体積は同一)に含まれる置換型原子数は等しい。しかし、その部分における侵入型原子数は異なっても良い。つまり侵入型元素が関与する場合、組織単位体積あたりに含まれる原子数はC濃度によって変化し得る(保存しない)ので、モル分率と濃度(単位体積あたり)を同等に扱うことができなくなる。したがって、このような場合に拡散場の計算を行うためには、単位体積当たりの濃度を別途明確に定義しなおす必要がある。そこで、Loginovaらの論文では以下のような定義が採用されている。

濃度(分率) u_x : 置換格子点1モル内に含まれるX成分の原子数を、アボガドロ数 N_{Av} で割った量

いま侵入型固溶体に対する通常の副格子モデルの定義に従い、Feサイトを副格子I、侵入位置を副格子IIとすると、置換型元素に関しては、 u_x は上記の副格子Iにおける副格子濃度に一致する。一方、侵入型元素に関しては、炭素Cを例にとると

$$u_c \equiv \frac{\frac{c}{a} N_{Av} y_c^II}{N_{Av}} = \frac{c}{a} y_c^II = \frac{xc}{1-xc} \dots\dots\dots (12)$$

のように計算される。 y_c^II は副格子IIにおける炭素Cの濃度で、

$$y_c^II \equiv \frac{a}{c} \frac{xc}{1-xc} \dots\dots\dots (13)$$

にて定義され²²⁾、 xc は炭素Cのモル分率である。 a と c については、fccでは、 $a=c=1$ 、およびbccでは $a=1, c=3$ である²²⁾。置換元素の体積が原子種および結晶構造に依存しないと近似できる場合には、この濃度場 u_x を用いることによって、矛盾無く組織形成のシミュレーションを進めることができる。平衡状態図の熱力学データベースにおいて、化学的自由エネルギーは副格子濃度を用いて記述されているので、式(12)を用いて u_c を y_c^II へ換算すれば良い。なお上記の定義から、化学的自由エネルギーとしては置換元素1モル当たりの値を採用する(Fe-C2元系では、Fe(Va, C)_{c/a}1モル当りに対応する)。Loginovaらの論文では、 u_c の定義については、それほど詳細に述べられていない。しかし鉄鋼材料の固相のシミュレーションにおいて、多元系への拡張も考慮して、以上のように濃度の定義を明確にしておくことが重要と思われる。

次にウイドマンステッテン組織の形成には、勾配エネルギー係数 ϵ^2 と α/γ 界面幅 δ の、方位 θ 依存性が重要であり、Loginovaらは、

$$\epsilon = \epsilon_0 \eta(\theta), \quad \delta = \delta_0 \eta(\theta) \dots\dots\dots (14)$$

と置いている。 ϵ_0 と δ_0 は定数で、 $\eta(\theta)$ は $0 < \eta(\theta) \leq 1$ の範囲を取る関数である。 $\eta(\theta)$ の関数形は α 相がプレート形状をとった時に安定になるように設定される。2次元シミュレーションでプレートの面に平行方向(すなわちウイドマンステッテンフェライトが成長する方向)を θ_0 とし、 $\eta(\theta)$ の関数形として、

$$\eta(\theta) = \frac{1}{1+\gamma} (1 + \gamma |\cos(\theta - \theta_0)|) \dots\dots\dots (15)$$

が採用されている(ちなみにプレートの面に垂直方向は $\theta_0 \pm \pi/2$)。ここで γ は正の定数である(オーステナイトの γ ではないので注意)。これより、

$$\begin{aligned} \theta = \theta_0 \text{の時、} & \quad \eta = 1 \\ \theta = \theta_0 \pm \frac{\pi}{2} \text{の時、} & \quad \eta = \frac{1}{1+\gamma} < 1 : \text{最小値} \end{aligned} \quad (\text{ただし正の値})$$

である。 $\eta(\theta)$ の関数形が式(15)の場合、 $\eta + \partial^2 \eta / \partial \theta^2$ が恒等的に正となるので、この関数形を用いると、式(4)の場合と異なり、不安定な界面方位は出現しない。しかし $\theta - \theta_0 = (1/2)n\pi$ (n は奇数)では η を θ で微分できない。これを微分可能なように、 $\theta = \theta_0 \pm \pi/2$ 近傍において $\eta(\theta)$ は以下のように設定されている。すなわち、 $-\pi/2 \leq \theta - \theta_0 \leq \pi/2$ の範囲において、

$$\eta(\theta) = \frac{1}{1+\gamma} \{1+B+A \sin(\theta-\theta_0)\},$$

$$\left(-\frac{\pi}{2} \leq \theta-\theta_0 \leq -\frac{\pi}{2} + \bar{\theta}\right)$$

$$\eta(\theta) = \frac{1}{1+\gamma} \{1+\gamma \cos(\theta-\theta_0)\},$$

$$\left(-\frac{\pi}{2} + \bar{\theta} < \theta-\theta_0 < \frac{\pi}{2} - \bar{\theta}\right)$$

$$\eta(\theta) = \frac{1}{1+\gamma} \{1+B-A \sin(\theta-\theta_0)\},$$

$$\left(\frac{\pi}{2} - \bar{\theta} \leq \theta-\theta_0 \leq \frac{\pi}{2}\right)$$

$$A = \frac{\gamma \cos(\bar{\theta})}{\cos(\bar{\theta})}, \quad B = \frac{\gamma}{\sin(\bar{\theta})}, \quad \bar{\theta} = \frac{\pi}{200},$$

$$0 \leq \gamma \leq 100 \quad \dots\dots\dots (16)$$

である。以上がLoginovaらの解析において、通常のPhase-field法と異なる主要な点である。以下、計算結果の1例を紹介する。

図3は、ウイドマンステッテンフェライトのコロニー成長の2次元シミュレーション結果¹⁵⁾で、黒い領域が γ 相、白い部分が α 相である。計算条件として優先成長方向は $\theta_0 = \pi/3$ に設定されている。針状にフェライト相が成長してくる様子が非常にきれいに計算されている。特にウイドマンステッテンフェライトの間隔が広い場合に成長速度が速く、間隔が込んでいる場所では成長速度が小さいことがわかる。

図3はウイドマンステッテンフェライト成長の計算結果であるが、同じシミュレーションプログラムにおいて、合金組成および熱処理温度の条件を変えるだけで、フェライト形態がアロトリオモルフとなったり、また析出機構がマッシュ変態となったりする成果が得られている¹⁵⁾。これは、フェライトの析出機構・形態が、炭素Cの拡散場と結晶変態(phase-field変数 ϕ のダイナミクス)のバランスによって生み出されていることを意味している。Fe-C系の固相変態は、合金組織学の分野では最も複雑な組織形成の1つである。しかしこの結果は、組織の複雑さの本質は実は単純であり、2つの競合する場のダイナミクス(この場合、拡散場と結晶変態場)のバランスとして理解できる可能性があることを示唆している。Phase-field法にて現象をより定量的にモデル化することによって、鉄鋼材料組織の複雑性の本質が近い将来明らかにされてくると考えられる。パーライト変態、ベイナイト変態、およびマルテンサイト変態は、定性的には拡散支

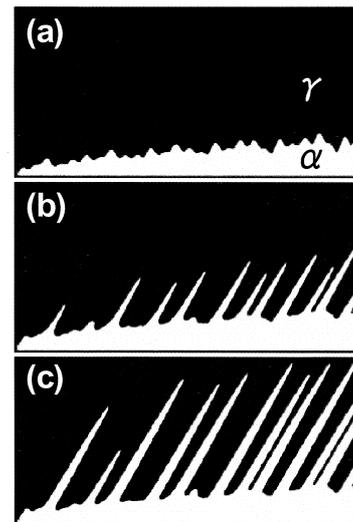


図3 ウイドマンステッテンフェライト成長の2次元計算結果¹⁵⁾

配の相変態が結晶変態支配の相変態に変化する一連の過程として理解できるが、本来これらの現象は、Phase-field法によるモデル化を通して、統一かつ定量的に記述できるのではないだろうか。

5 おわりに

材料における組織形成過程は、典型的な非線形現象を含む場合が多く、従来、相変態の計算機シミュレーションの分野は定性的な議論が中心であった。しかし近年の計算機の発展は、このような相分解組織制御を設計シミュレーションとして行うことを可能にしつつある。最近ではパソコンの高性能化に伴い、ほとんど対話式に材料の組織形成過程を計算機実験することも可能である。しかし、いかに計算機が発展しても、材料の組織形成を完全に理論もしくはシミュレーションに基づき予測することは原理的に不可能である。したがって、実験データを念頭に置き、試行錯誤の要素も加味しながら対話式に材料設計を行える組織形成計算システムの構築が重要であろう。本計算のPhase-field法は、不均一系の全エネルギーがある秩序変数の集合を用いて正確に記述できるならば、いかなる組織形成現象も計算の対象とすることができる。材料内部組織と組織設計プロセスを総合かつ定量的にモデル化することができる利点は大きく、今後、鉄鋼材料設計の有力な手段となると思われる。現在、鉄鋼材料へのPhase-field法の適用は始まったばかりである。わが国において、高炉内部の反応を定量的にモデル化し、そのことが鉄鋼精錬の分野で大きなブレイクスルーおよび国際競争力になったことは、鉄鋼にたずさわる研究者・技術者にとって周知の事実であろう。鉄鋼材料組織のナノおよびメゾスケールにおける

定量的なモデル化は、これに匹敵する、もしくはそれ以上の武器になるかもしれない。

なお本稿では、より基礎的な事項やさらに進んだ計算理論の詳細については紙面の関係上ふれなかった。計算理論に関する基礎に関しては文献9)をご参照願いたい。また各種のデモプログラムやより進んだ計算理論の詳細については、著者のホームページ (http://www.nims.go.jp/cmssc/pst/koyama/Phase-Field_Modeling.htm) にて公開しているので、ご興味のある方は参照していただきたい。

謝辞

本稿を執筆するにあたり快く計算結果の図をご提供くださいました、(独)物質・材料研究機構、大出真知子氏ならびに東京大学、鈴木俊夫教授に感謝いたします。

参考文献

- 1) R.Kobayashi : Physica D, 63 (1993), 410.
- 2) 小林 亮 : 金属学会セミナー, パソコンで学ぶ材料工学, (2001), 67.
- 3) A.A.Wheeler, W.J.Boettinger and G.B.McFadden : Phys.Rev.A, 45 (1992), 7424.
- 4) J.A.Warren and W.J.Boettinger : Acta Metall.Mater., 43 (1995), 689.
- 5) 鈴木俊夫 : 金属学会セミナー, 凝固および結晶成長, (2002), 49.
- 6) M.Ode, S.G.Kim and T.Suzuki : ISIJ Int., 41 (2001), 1076.
- 7) 大出真知子, 鈴木俊夫 : 鑄造工学, 73 (2001), 335.
- 8) L-Q.Chen : Annu.Rev.Mater.Res., 32 (2002), 113.
- 9) 小山敏幸 : ふえらむ, 9 (2004), 240, 301, 376, 497.
- 10) 小山敏幸 : 第180・181回西山記念技術講座, 鉄鋼材料の組織と材質予測技術, (2004), 47.
- 11) 小山敏幸 : 日本金属学会会報, まてりあ, 42 (2003), 397, 470.
- 12) 宮崎 亨 : 日本金属学会会報, まてりあ, 41 (2002), 334.
- 13) 小山敏幸, 小坂井孝生, 宮崎亨 : 日本金属学会会報, まてりあ, 38 (1999), 624.
- 14) M.Ode and T.Suzuki : ISIJ Int., 42 (2002), 368.
- 15) I.Loginova, J.Agren and G.Amberg : Acta Mater., 52 (2004), 4055.
- 16) J.J.Eggleston, G.B.McFadden and P.W.Voorhees : Physica D, 150 (2001), 91.
- 17) T.Uehara and R.F.Sekerka : J. Crystal Growth, 254 (2003), 251.
- 18) S.G.Kim, W.T.Kim and T.Suzuki : Phys Rev. E, 60 (1999), 7186.
- 19) 数値流体力学編集委員会編, 格子形成法とコンピュータグラフィックス, 東京大学出版会, (1995), 47.
- 20) A.Karma : Phys.Rev.Let., 87 (2001), 115701.
- 21) 榎本正人 : 金属の相変態 材料組織の科学入門, 内田老鶴圃, (2000)
- 22) N.Saunders and A.P.Miodownik : CALPHAD, Pergamon, (1998)

(2004年8月31日受付)