



特集記事・4

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

フェーズフィールド法による凝固組織形成の解析

Analysis of Solidification Microstructure by Phase-Field Method

大野宗一

北海道大学 大学院工学研究院
准教授

Munekazu Ohno

1 はじめに

凝固組織の形成過程には、流動・伝熱・溶質拡散・変形など、複数の物理現象が関与する。それぞれの物理現象に固有の特性長さは多くの場合数桁異なることから、凝固組織の形成は複数の不均一場の時間発展が広範囲の時空間スケールで関与する問題であり、さらにそれぞれの物理現象に関わる境界条件（プロセス条件）の変化に組織形成が敏感に応答するという難しさがある。近年、放射光X線イメージング^{1,2)}や共焦点レーザー走査型顕微鏡^{3,4)}といったその場観察技術の発展が目覚ましく、鋼の凝固組織形成に関わる貴重な知見が見出されている。そして、その場観察という強力なツールに加えて、凝固工学の分野では組織形成シミュレーション法が重要なツールとして発展している。いくつかの手法の中で、フェーズフィールド法 (phase-field method) は thin-interface limit に基づく定式化の方法 (定量的フェーズフィールド法) の出現によって、この分野における最も重要な手法としての地位を築きつつある⁵⁾。本稿では、著者らが行ってきた鋼の凝固組織形成のための定量的フェーズフィールド法の開発並びにその手法を用いた解析例を紹介する。

2 合金凝固の定量的フェーズフィールド法

ここでは、著者らがその開発に携わってきた定量的フェーズフィールド法の重要性を強調して、この手法の説明を行う。フェーズフィールド法の一般的な概要に関しては解説や書籍^{6,8)}を参考にさせていただきたい。なお、CALPHAD法と連携させることで実用合金系における相変態の駆動力を導入したフェーズフィールド法のことを、定量的フェーズフィールド法と呼ぶこともあるが、本稿ではこの言葉をその意味で用いていない。本稿における定量的フェーズフィールド法と

は、thin-interface limit に基づく手法を意味する。CALPHAD法を使用するか否かに関わらず、与えられた物性値のもとで、定量的に意味のある結果を算出できるか否かによって、従来の手法と定量的手法を区別する。

フェーズフィールド法においては、組織中に現れる相の種類を秩序変数 ϕ によって区別する。凝固を扱う際には、例えば、固相の領域で $\phi = +1$ 、液相の領域で $\phi = -1$ となる変数を定義する。 ϕ の値が +1 から -1 に連続的に変化する領域が固液界面に相当し、界面は有限の幅 W を持つことになる。 ϕ の時間発展に加えて、濃度場や温度場などの時間発展を連立して解くことで組織の時間変化が計算される。ここで、時間発展方程式を解くために計算システムを格子点に分割する際、その格子点間隔 Δx は W よりも小さくする必要があることに注意すべきである。 W を小さな値に設定してしまうと計算コストが膨大になるため、現実の固液界面幅の値 (数 nm 程度) を用いることは不可能であり、実質的に W には任意の値が設定される。

一般に、フェーズフィールド法は、良く確立された界面移動の法則を忠実に再現するように定式化される。従来のフェーズフィールド法では、 W が 0 の極限において望みの界面移動の dynamics を再現するように構築されている。これを sharp-interface limit と呼ぶ。しかし、実際のシミュレーションでは W が 0 ではないため、従来の手法では界面移動の dynamics が適切に再現されておらず、その計算結果は W に依存してしまう。計算結果が W にほぼ依存しないようにするためには、組織のスケールに比べて極端に小さな値の W を用いる必要がある^{9,11)}。言い換えると、 W を小さな値に近づけた際の計算結果の収束が極めて遅い。

上記の問題を解決したのが定量的フェーズフィールド法である。従来の手法が sharp-interface limit (W が 0 の極限) に基づいて定式化されているのに対して、定量的フェーズフィールド法は、thin-interface limit (W が 0 ではない有限の値の極

限)に基づいて定式化されている。定量的フェーズフィールド法においては、 W に対する計算結果の収束が極めて早く、実際の界面幅よりも数桁大きな値を用いて高精度な計算が可能である。定量的フェーズフィールド法は、純物質の凝固過程に対して初めて提案された¹¹⁾。そして、二元系^{12,13)}や多元系合金¹⁴⁾の単相凝固や多相凝固¹⁵⁾の計算に拡張されてきた。しかし、合金の凝固を対象とするこれらの手法は、固相内拡散が無視できる場合を想定して構築されており、炭素原子の固相内拡散が無視できない炭素鋼の凝固過程に適用することができなかった。そこで、著者らは、固相内拡散を考慮した二元系¹⁶⁾、多元系合金の単相凝固¹⁷⁾、そして多相凝固¹⁸⁾を扱う定量的フェーズフィールド法を開発してきた。ここでは、二元系合金の非等温凝固を扱う定量的フェーズフィールド法を例に、この手法の重要な点を説明する。

二元系合金の非等温凝固を対象とするとき、秩序変数 ϕ の他、濃度 c と温度 T の時間変化を計算する。ここでは、各方程式の導出過程は割愛し、最終的な形式のみを示す。 ϕ の時間発展方程式は、以下のように与えられる。

$$\frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \omega f'_{dw}(\phi) - g'(\phi) \Delta f_{drive} \dots \dots \dots (1)$$

ここで、 M_ϕ は ϕ の移動度、 ε は勾配エネルギー係数、 ω は界面ポテンシャルの障壁高さ、 Δf_{drive} は凝固の駆動力である。 $f'_{dw}(\phi)$ は、 $\phi = \pm 1$ で極小値をもつ二重井戸型関数 $f_{dw}(\phi)$ の ϕ に関する一次導関数であり、ここでは $f'_{dw} = -\phi + \phi^3$ と与えられる。また、 $g'(\phi)$ は ϕ の単調増加関数 $g(\phi)$ の一次導関数であり、 $g'(\phi = \pm 1) = 0$ を満足する。ここでは、 $g'(\phi) = 15(1 - \phi^2)^2/16$ と与えられる。議論を単純にするため、希薄固溶体近似を用いると、凝固の駆動力 Δf_{drive} は、

$$\Delta f_{drive} = \frac{L}{T_m} (T - T_0) + \frac{RT_m}{v_m} (1 - k) (c_l - c_l^e) \dots \dots \dots (2)$$

と与えられる。ここで、 L は単位体積当たりの凝固潜熱、 T_m は純物質の融点、 v_m はモル体積、 R は気体定数、 k は分配係数である。 c_l^e は温度 T_0 における液相の平衡濃度である。 c_l は濃度 c と、 $c = (1+k - (1-k)\phi)c_l/2$ という関係で結ばれている。ここで詳細を説明することはできないが、初期の合金凝固モデルにおいては界面物性が界面内の濃度プロファイルに依存するという問題があった。上記の駆動力の形式は、その問題を解決した Kim-Kim-Suzuki モデル¹⁹⁾ に基づいて導出されている。また、式 (1) は固液界面エネルギーが等方的であるとして導出したものである。固液界面エネルギーの異方性の効果は、式 (1) の右辺第一項に考慮することになるが、ここではその詳細を割愛する。

濃度 c の時間発展方程式は以下のように与えられる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[D(\phi) \nabla c_l - \bar{J}_{AT,c} \right] \dots \dots \dots (3)$$

ここで、 $D(\phi)$ は、液相と固相の拡散係数を、それぞれ D_l, D_s としたとき、 $D(\phi) = (D_l + kD_s - (D_l - kD_s)\phi)/2$ と与えられる。式 (3) の右辺括弧内の第二項は、antitrapping current と呼ばれる流束項であり、界面における溶質分配を補正する効果を持つ。この項は、以下のように与えられる。

$$\bar{J}_{AT,c} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 - \frac{kD_s}{D_l} \right) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\omega}} (1 - k) c_l \frac{\partial \phi}{\partial t} \bar{n} \dots \dots \dots (4)$$

ここで、 \bar{n} は固液界面の単位法線ベクトルであり、 $\bar{n} = -\nabla \phi / |\nabla \phi|$ と与えられる。

温度 T の時間発展方程式は、以下のように与えられる。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \left[\alpha(\phi) \nabla T - \bar{J}_{AT,T} \right] + \frac{1}{2} \frac{L}{C_p} \frac{\partial \phi}{\partial t} \dots \dots \dots (5)$$

ここで、 $\alpha(\phi)$ は、液相と固相の熱拡散率を、それぞれ α_l, α_s としたとき、 $\alpha(\phi) = (\alpha_l + \alpha_s - (\alpha_l - \alpha_s)\phi)/2$ と与えられる。また、 $\bar{J}_{AT,T}$ は温度場の antitrapping current であり、

$$\bar{J}_{AT,T} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_l} \right) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\omega}} \frac{L}{C_p} \frac{\partial \phi}{\partial t} \bar{n} \dots \dots \dots (6)$$

と与えられる。ここで、 C_p は定圧比熱である。

上記の式 (1)、(3)、(5) を連立して解くことで、二元系合金の非等温凝固過程をシミュレートできる。また、この手法は、等温凝固や一方向凝固の計算にも応用可能である。ここで、インプットパラメータについて説明する。この計算に必要なインプットパラメータは、 $M_\phi, \varepsilon, \omega, L, T_m, k, v_m, D_s, D_l, \alpha_s, \alpha_l, C_p$ であり (c_l^e は T_0 を指定すると、 L, T_m, k, v_m から得られる)、このうち $M_\phi, \varepsilon, \omega$ を除いて、全て測定可能な物性値であるから、それぞれ実測値や計算値を直接インプットすることができる。しかし、 $M_\phi, \varepsilon, \omega$ は、フェーズフィールド法に固有の現象論的係数である。組織形成はこれらの値に敏感に依存するため、適切な値を設定する必要がある。既に述べたように、定量的フェーズフィールド法は、対象とする界面移動の法則を再現するように構築されている。上記の式 (1)、(3)、(5) は、その解がバルク中の熱・溶質拡散、界面移動に伴うエネルギー・質量保存則、そして Gibbs-Thomson 効果を適切に満足するように構築されている。その定式化の際に、現象論的係数 $M_\phi, \varepsilon, \omega$ は、測定可能な物性値と関連付けられる。上記のインプットパラメータに加えて、固液界面エネルギー σ を与えることで、全て決定することが可能である。具体的には、 $\sigma = (2/3) \varepsilon (2\omega)^{1/2}$ と $W = \varepsilon / \omega^{1/2}$ という関係が成立するため、 σ と W を与えると、 ε と ω の値が決め

られる。また、 $M\phi$ は、

$$M\phi = \left\{ \frac{a \varepsilon^2}{J \omega} \left[\frac{L^2}{C_p T_m \alpha_l} + \frac{1}{v_m} + \frac{RT_m (1-k)^2 c_l}{D_l} \right] \right\}^{-1} \dots\dots\dots (7)$$

と与えられる。ここで、 a と J は関数 $f_{dw}(\phi)$ と $g(\phi)$ の形に依存する定数であり、上記の関数を用いた場合、 $a = 0.6267$ 、 $J = 16/15$ となる。なお、式(7)はGibbs-Thomson効果における動力学的効果を見捨てた場合の関係式である。式(7)の右辺にある定数は、上で求めた ε と ω の他は全て測定可能な物性値であり、この手法においては現象論に起因する未知の定数は存在しない。ただし、式(1)、(3)、(5)の連立方程式を解くためにシステムを格子点に分割する際、空間格子点間隔 Δx は計算の精度を左右するパラメータとして調整する必要がある。これと同じ意味で、界面幅 W も計算の精度を左右するため、計算コストと精度の兼ね合いでこの値を決める必要がある。

3 炭素鋼の凝固組織形成シミュレーション

3.1 デンドライト成長

本節では、まず等温デンドライト成長の計算¹⁶⁾を例に定量的フェーズフィールド法の精度を議論する。次に、この手法を用いて、現在どの程度のシステムサイズを計算対象とできるのかについて例を紹介する。

図1は、等温凝固におけるデンドライト成長過程を定量的フェーズフィールド法で計算した結果である。これは仮想的な二元系合金を対象としたものであり、分配係数を $k = 0.15$ 、初期過飽和度を $u_0 = (c_l - c_s^e) / (c_l^e - c_s^e) = -0.55$ 、固相と液相中の拡散係数の比を $D_s/D_l = 0.1$ と与えている。空間座標はキャピラリー長 d_0 で無次元化している。また、界面幅を $W = 4 d_0$ としている。ここで、デンドライト成長中の濃度プロファイルは、成長形態やマイクロ偏析に直結する重要なものである。図2に示したのは、デンドライト成長方向の空間座標

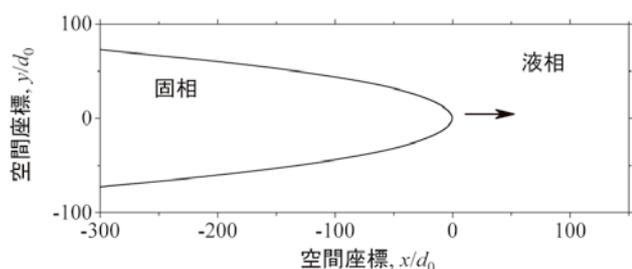


図1 等温凝固におけるデンドライト成長先端の定量的フェーズフィールド・シミュレーション結果。実線は $\phi = 0$ の等高線を示す

に対する定常状態の濃度プロファイルである。デンドライト先端位置は、 $x/d_0 = 0$ に相当する。また、縦軸の濃度は、過飽和度 $u = (c_l - c_s^e) / (c_l^e - c_s^e)$ で示した。図2には、 $W = 1.25 d_0$ と $4 d_0$ の場合の定量的手法 (Quantitative Phase-Field Method (PFM) と表記) 並びに従来の手法 (Standard PFM) の計算結果を示している。従来の手法の計算結果は W に大きく依存していることが分かる。一方で、定量的手法の二つの結果はほぼ重なっており、 W に依存していない。従来の手法の結果も W を小さくすることで、定量的手法の結果に漸近していくが、その速度は極めて遅い。定量的手法においては、 W を任意の値に設定しても、一意的な結果が得られることが分かる。ただし、組織中に形成する固液界面の最小の曲率半径よりも W を大きくすることはできないから、 W には合金系や変態の条件に応じた最大値が存在する。重要な点は、従来の手法よりも大きな W を用いて、従来の手法よりも高精度な結果が得られることである。

フェーズフィールド・シミュレーションは、一般に計算負荷が大きく、現在までに対象とできるシステムサイズや凝固条件に大きな制約があった。しかし、近年では並列計算アーキテクチャの開発が進み、その制約が緩和されつつある。特に、フェーズフィールド・シミュレーションはGPU並列計算と相性が良く、ワークステーション・レベルで近年著しい高速化が進んでいる²⁰⁾。図3に示したのは、定量的フェーズフィールド法による二次元シミュレーションの結果であり、0.1mass%炭素鋼におけるフェライトの一方凝固を計算したものである。GPU並列計算 (Tesla K20) によって高速化を達成しており、4mm×4mmサイズのシステムを5120×5120個の格子点に分割して比較的高精度な計算を行った。初期にシステムの底部に固相を与え、図の右側の矢印で示したように、温度勾配の方向 \mathbf{G} を垂直方向に設定している。そして、その大きさを1 K/mmとし、引抜速度を0.1 mm/sとした。また、図右側の矢印で示すように、結晶の<100>優先成長方

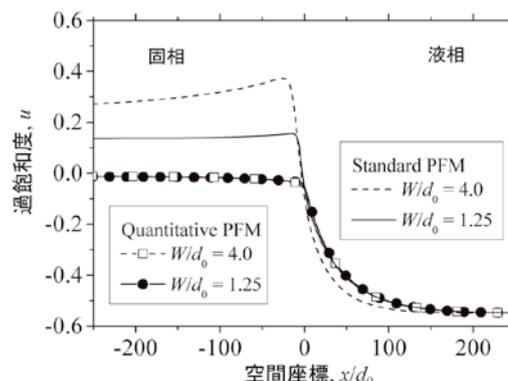


図2 デンドライト中心軸上の濃度プロファイル¹⁶⁾。定量的手法のプロット点は実際の格子点の数十点おきに示している

向 \mathbf{a} は、温度勾配の方向から 15° 傾いている。凝固初期に平滑界面からセル状の固相が温度勾配方向に成長し、その後、競合成長による淘汰の過程においてデンドライト一次アーム間隔を増加させながら、固相の成長方向が徐々に優先成長方向へ傾いていく様子が観察される。この組織変化はまだ初期過冷度の影響を強く受けており、定常状態に達する前の状態であるが、現状の計算規模を表すものとしてここに示した。この計算には数時間を要するが、Preconditioning²¹⁾やAdaptive Mesh Refinement²²⁾などの計算技術と組み合わせることによって、さらなる高速化が可能であると考えられる。このような数十本のデンドライト間の競合成長を日常的にシミュレートすることが可能になりつつあり、凝固組織シミュレーションの有用性が今後益々高まることが期待される。また、スーパーコンピュータ・レベルでは、一辺が約4 mmサイズの三次元システムにおけるAl-Si合金の一方凝固がシミュレートされており、百本以上のデンドライト競合成長が詳細に解析されるまでになっている²³⁾。

3.2 包晶反応

包晶凝固は、多くの実用材料において観察される現象であり、包晶凝固を伴う鋼種の凝固組織を制御するためには、そのkineticsを理解することが重要であると考えられる。ここでは、Fe-C二元系合金における包晶反応の計算結果を紹介する。

Kerrらの定義に従えば、包晶凝固は、包晶反応と包晶変態の二つのステージに分けられる²⁴⁾。液相をL相、初晶を δ 相、そして包晶凝固によって生じる固相を γ 相と表記すると、一つ目のステージはL/ δ 界面に沿って γ 相が成長する過程であ

り、二つ目のステージは γ 相が δ 相を覆い尽くした後の δ/γ 界面移動とL/ γ 界面移動によって特徴づけられる。包晶反応は、L/ γ/δ 三重点のkineticsであり、この三重点の移動速度と軌跡がその後の組織形成に影響を及ぼす。Hillertは、包晶反応における三重点近傍の相の形態について考察し、図4の形態で包晶反応が生じるとした²⁵⁾。この図は、L/ δ 界面に沿って γ 相が上部方向に成長している様子を表している。この形態は、三重点の界面形状が界面エネルギーのバランスによって決定されること、そして固相内拡散が無視できることを仮定することで導かれる。FredrikssonとNylénは、次に述べる事実からも図4の形態が現れることを議論した²⁶⁾。図5の状態図から理解できるように、包晶反応温度以下では、 γ 相と平衡するL相の濃度 $c_{L,\gamma}^e$ は、 δ 相と平衡するL相の濃度 $c_{L,\delta}^e$ よりも高い。従って、 γ 相の成長先端近傍の液相には、初期濃度 $c_{L,\delta}^e$ より高い濃度領域が生じる。その結果、 δ 相が一旦融解することになり、図4の形態が形成すると考えられる。

図4の形態において重要な点は、 γ 相の成長先端はL/ γ 界面であり、包晶反応は実質 γ 凝固によって進行している点である。したがって、包晶反応速度、すなわちこの図において γ 相が上部方向に成長する速度は、 γ 凝固の速度に相当する。そこで、FredrikssonとNylénは、単相から単相への変態速度の解析モデル²⁷⁾を包晶反応速度の解析に適用した²⁶⁾。本稿では、この解析モデルをFNモデルと呼ぶことにする。FNモデルは様々な合金系の包晶反応速度の解析に用いられている。しかし、このモデルの計算結果は実測値と比較して、反応速度を過小評価することが知られている。特に、Fe-C合金の計算値は、共焦点レーザー走査型顕微鏡によるその場観察の実測値よりも数桁低い³⁾。つまり、単相凝固速度を記述す

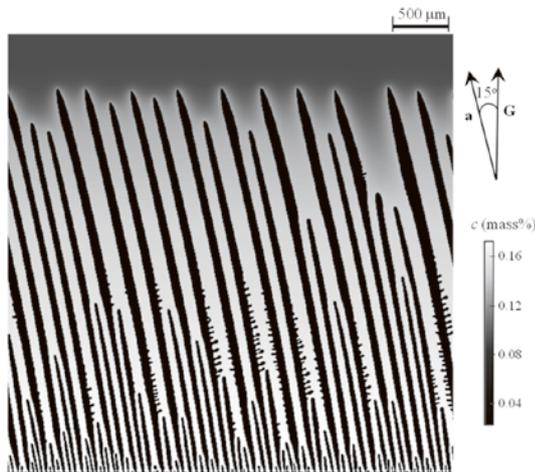


図3 GPU並列計算を用いた0.1mass%鋼における一方凝固の定量的フェーズフィールド・シミュレーション結果。図の右側の矢印は温度勾配方向(G)とフェライトの優先成長方向 $\langle 100 \rangle$ (a)を示す

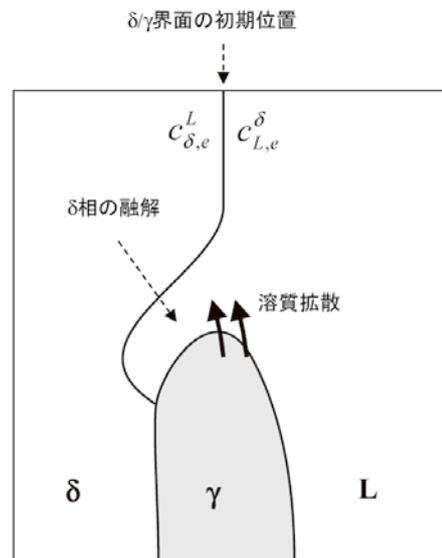


図4 包晶反応における γ 相成長先端の形状の模式図

るFNモデルでは包晶反応速度を適切に予測することができない。こういった背景から、我々のグループは、包晶反応速度をフェーズフィールド・シミュレーションによって明らかにすることを試みた²⁸⁾。まず、多相凝固のkineticsを高精度に記述する定量的フェーズフィールド法を構築し¹⁸⁾、その定量的手法をFe-C合金における反応速度の解析に適用した²⁸⁾。その手法の詳細は割愛し、結果のみを以下に議論する。

図6に示したのは、Fe-C二元系合金の包晶反応を定量的フェーズフィールド法でシミュレートした結果である。これは等温保持中に現れる三重点近傍の相の形態を表しており、包晶反応温度からの過冷度 ΔT を10 Kとしたものである。初期にL相と δ 相は保持温度で平衡しており、L/ δ 界面の初期位置は $x = 0$ の位置に相当する。図6 (a) において、三重点は $x < 0$ の領域に位置している。これは、図4で述べた δ 相の融解現象が生じたことを意味している。しかし、図6 (a) における融解量はそれほど大きくない。これは後ほど述べるよう

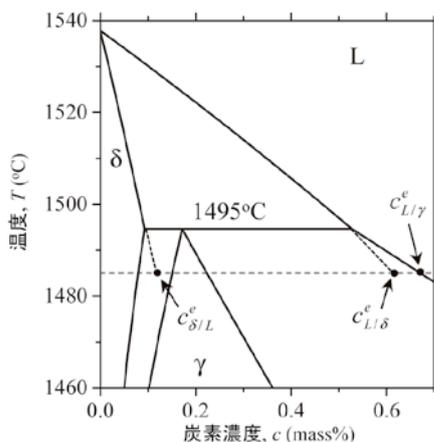


図5 Fe-C二元系状態図

に、Fe-C合金においては固相内拡散が無視できず、三重点の軌跡に δ/γ 界面の移動が影響を及ぼしているためである。その結果、 γ 相の成長先端はL/ γ 界面ではなく、三重点に相当することが分かる。つまり、Fe-C合金にFNモデルを適用することはできない。

図7は、Fe-C二元系合金における包晶反応速度の過冷度依存性である。定量的手法の計算結果を黒丸で示し、さらにShibataらのその場観察結果³⁾を白丸でプロットしている。定量的手法の計算値は、その場観察の実測値と同等のオーダーであることが分かる。なお、FNモデルの計算結果は定量的手法の計算値よりも数桁も低い。ただし、定量的手法の計算値は実測値と完全に一致しているわけではない。本計算では、L相と δ 相が包晶反応開始前に平衡しており、各種物性値の濃度依存性が無視できることを仮定している。このとき、包晶反応速度は炭素濃度に依存しない。したがって、実測値の濃度依存性を議論するためには δ 凝固の影響や物性値の濃度依存性を考慮した解析が必要であり、これは今後の課題として残る。

ここで、三重点近傍における相の形態を再度議論する。Fe-C合金の包晶反応においては図6 (a) の形態が現れるため、包晶反応を γ 凝固として扱うことができないことを既に述べた。図6 (b) に示したのは、 δ 及び γ 相内の拡散係数をそれぞれ1/1000倍にしたときの計算結果である。ここに示したものは、まだ完全に定常状態に達していないものの、図6 (a) に比べて、 δ 相の融解量が増大していることが分かる。このときの γ 相の成長先端はL/ γ 界面であり、図4で想定した γ 凝固が生じている。また、分配係数のみを変化させても、図4の形態が生じる。図6 (c) は、 γ 相と δ 相の分配係数を変化させたときの計算結果であり、Fe-C二元系に比べて、 δ 相と γ 相間の濃度差が大きくなっている。その結果、 δ/γ 界面の移動

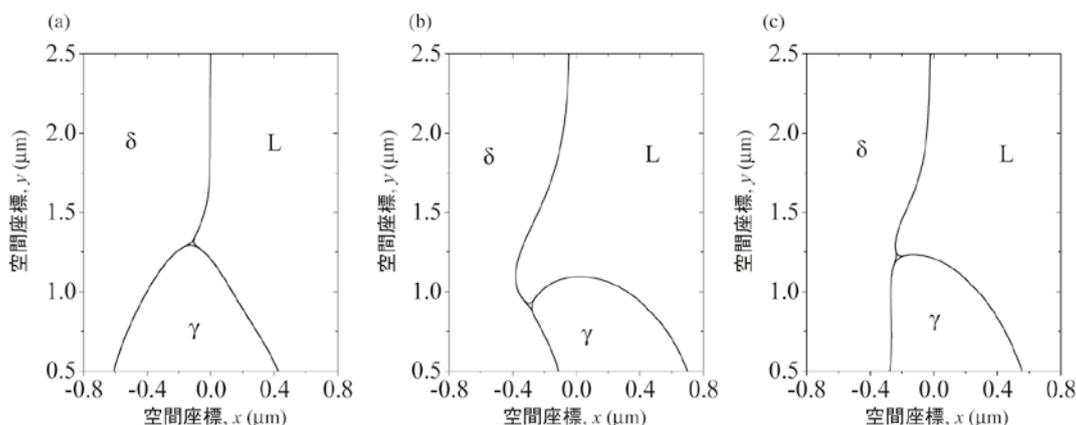


図6 定量的フェーズフィールド法から計算された包晶反応で形成する三重点近傍の組織^{28,29)}。(a) Fe-C二元系合金の計算結果、(b) Fe-C二元系合金における δ 相と γ 相の拡散係数を1/1000倍にした場合の結果、(c) Fe-C二元系合金における γ/δ 間の分配係数を約3.5倍にした場合の結果

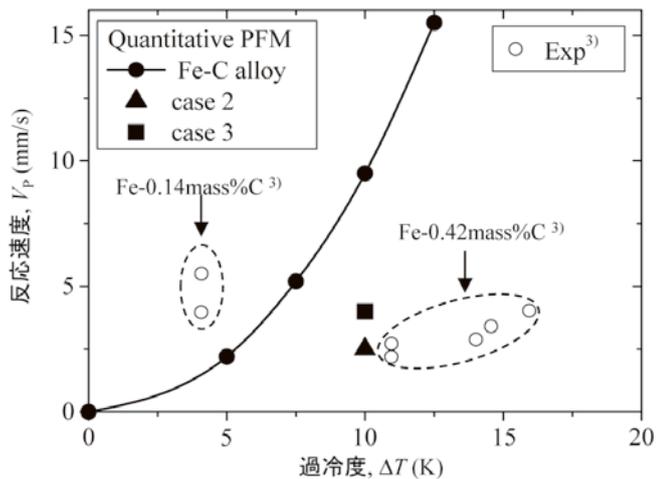


図7 Fe-C合金における包晶反応速度の過冷度依存性の計算結果(黒丸)とその場観察の実験結果(○)³⁾。Case 2(▲)は δ と γ 相の拡散係数を1/1000倍にした場合の計算結果。Case 3(■)は γ/δ 間の分配係数を約3.5倍にした場合の計算結果

速度が減少し、図4と類似の形態が形成している。図6(b)と(c)の包晶反応速度を図7にそれぞれ三角形と四角形のプロット点で示した。Fe-C二元系の計算結果に比べて、いずれの場合も速度が低下していることが分かる。このような反応速度の拡散係数依存性と分配係数依存性については²⁹⁾、最近のその場観察の解析において同様の傾向が確認されている³⁰⁾。

4 おわりに

本稿では、フェーズフィールド法による凝固組織形成の解析に関する最近の話題として、著者らが行ってきた定量的フェーズフィールド法の開発と炭素鋼の凝固組織形成の解析例を紹介した。ここであえて強調するまでもないが、組織形成の問題は大変複雑であり、既存のシミュレーション手法で全ての答えが得られるわけではない。物性値の精度、境界条件の適切さ、そして未知・未考慮の物理現象の効果や揺らぎに起因する効果など、計算結果を不確かにする要因は複数ある。組織形成の問題が複雑であり、不確かさを伴うがゆえに、良く調べられ、良く実証されてきた界面移動の法則を適切にそして高精度に再現することは、組織形成シミュレーション法におけるminimum requirementであると考えられる。このことは、定量的フェーズフィールド法が凝固組織形成シミュレーション法の主流になりつつあることから理解できる。定量的フェーズフィールド法には、まだ改善・一般化の余地があり、現在、諸外国の研究者がこの手法の発展に鋭意取り組んでいる。

定量的フェーズフィールド法のインプットパラメータについて2章で説明した。どのパラメータも計算には不可欠であ

るが、組織の計算における最も重要な物性値の一つが、固液界面物性に関わるパラメータである。固液界面エネルギーは数%の異方性を有し、その数%のわずかな異方性がデンドライト成長のkineticsを決めている。しかし、固液界面エネルギーの実測値は、限られた合金系の限られた濃度範囲でのみ報告されている。したがって、界面物性値を如何に高精度に求めるのが、組織形成シミュレーション分野における重要な課題となっている。現在では、放射光X線イメージング^{1,2)}などのその場観察結果とシミュレーション結果の直接比較から、界面物性値を推算することが可能であると考えられる。加えて、分子動力学法から固液界面物性を算出することが試みられている^{31,32)}。組織形成に関わる物性値算出の取り組みが今後益々活発になることを期待したい。

参考文献

- 1) H.Yasuda, T.Nagira, M.Yoshiya, N.Nakatsuka, A.Sugiyama, K.Uesugi and K.Umetani : ISIJ Int., 51 (2011), 402.
- 2) 安田秀幸, 柳楽知也, 吉矢真人, 杉山明, 中塚憲章, 森田周吾 : ふえらむ, 19 (2014), 121.
- 3) H.Shibata, Y.Arai, M.Suzuki and T.Emi : Metall.Mater. Trans., 31B (2000), 981.
- 4) D.Phelan, M.Reid and R.Dippenaar : Mater.Sci.Eng.A, 477 (2008), 226.
- 5) I.Steinbach : JOM, 65 (2013), 1096.
- 6) 小山敏幸 : 材料設計計算工学 計算組織学編 -フェーズフィールド法による組織形成解析-, 内田老鶴圃, (2011)
- 7) 高木知弘, 山中晃徳 : フェーズフィールド法 -数値シミュレーションによる材料組織設計-, 養賢堂, (2012)
- 8) フェーズフィールド法の情報提供ウェブサイト (<http://www.pfm.kit.ac.jp/index.html>) に解説・レビュー記事や書籍のリストが掲載されている
- 9) A.A.Wheeler, B.T.Murray and R.Schaefer : Physica D, 66 (1993), 243.
- 10) S.-L.Wang and R.F.Sekerka : Phys.Rev.E, 53 (1996), 3760.
- 11) A.Karma and W.-J.Rappel : Phys.Rev.E, 57 (1998), 4323.
- 12) A.Karma : Phys.Rev.Lett., 87 (2001), 115701.
- 13) B.Echebarria, R.Folch, A.Karma and M.Plapp : Phys. Rev.E, 70 (2004), 061604.
- 14) S.G.Kim : Acta Mater., 55 (2007), 4391.
- 15) F.Folch and M.Plapp : Phys.Rev.E, 72 (2005), 011602.
- 16) M.Ohno and K.Matsuura : Phys.Rev.E, 79 (2009), 031603.
- 17) M.Ohno : Phys.Rev.E, 86 (2012), 051603.
- 18) M.Ohno and K.Matsuura : Acta Mater., 58 (2010),

- 5749.
- 19) S.G.Kim, W.T.Kim and T.Suzuki : *Phys.Rev.E*, 60 (1999) , 7186.
- 20) A.Yamanaka, T.Aoki, S.Ogawa and T.Takaki : *J.Crys. Growth*, 318 (2011) , 40.
- 21) K.Glasner : *J.Comput.Phys.*174 (2001) , 695.
- 22) N.Provatas, N.Goldenfeld and J.Dantzig : *Phys.Rev.Lett.*, 80 (1998) , 3308.
- 23) T.Takaki, T.Shimokawabe, M.Ohno, A.Yamanaka and T.Aoki : *J.Crys.Growth*, 382 (2013)
- 24) H.W.Kerr, J.Cisse and G.F.Bolling : *Acta Mater.*, 22 (1974) , 677.
- 25) M.Hillert : *Solidification and Casting of Metals*, The Metals Society, London, (1979)
- 26) H.Fredriksson and T.Nylen : *Met.Sci.*, 16 (1982) , 283.
- 27) W.Bosze and R.Trivedi : *Metall.Trans.*, 5 (1974) , 511.
- 28) M.Ohno and K.Matsuura : *Acta Mater.*, 58 (2010) , 6134.
- 29) M.Ohno and K.Matsuura : *ISIJ Int.*, 50 (2010) , 1879.
- 30) S.Griesser, C.Bernhard and R.Dippenaar : *ISIJ Int.*, 54 (2014) , 466.
- 31) M.Asta, C.Beckermann, A.Karma, W.Kurz, R.Napolitano, M.Plapp, G.Purdy, M.Rappaz and R.Trivedi : *Acta Mater.*, 57 (2009) , 941.
- 32) Y.Shibuta, K.Oguchi and M.Ohno : *Scripta Mater.*, 86 (2014) , 20.

(2014年7月22日受付)