

Phase-Field-Crystal 法と分子動力学法の比較

京都工芸繊維大学 高木 知弘

Phase-Field-Crystal Method and Molecular Dynamics Method

Tomohiro TAKAKI

1. はじめに

Phase-field-crystal (PFC) 法は、金属材料内の原子構造の規則正しい配列を、周期的に分布する秩序変数 (phase field 変数) によって表現する新しいモデルである⁽¹⁾。PFC 法は、分子動力学 (MD) 法と同程度の空間スケールを対象とするが、非常に大きな時間増分をとることが可能であり、新しいマルチスケール手法として期待されている。

PFC 法を変形特性評価に用いる場合、外力の与え方など境界条件の設定が困難となる。著者らは、差分格子間隔を変形に応じて変化させ、塑性変形中の体積一定変形を再現する手法を構築した⁽²⁾。また、本手法を用いて、様々な条件の下でのナノ多結晶体の変形シミュレーションを行うことで、PFC 法が変形評価手法として有用であることを示した⁽³⁾。

本稿では、PFC 法の基本的なメカニズムを概説し、広い温度範囲での変形シミュレーションを試みる。また、MD 法との比較についても考察を行う。

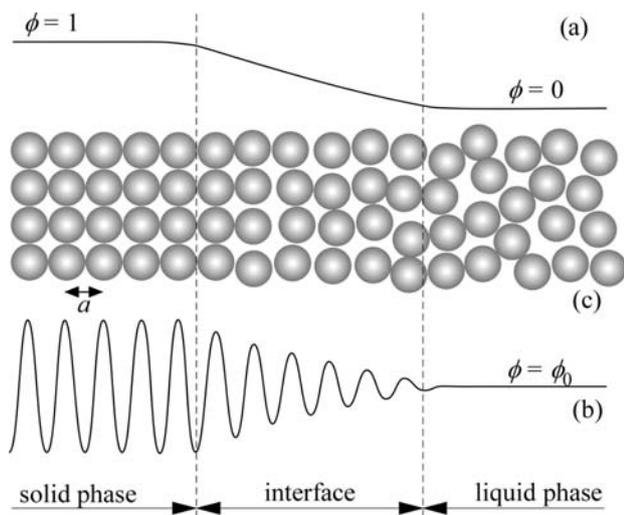


Fig. 1 Phase field variables (a) phase field for normal PF method, (b) phase field for PFC method and (c) atomic distribution around solid-liquid interface

2. PFC 法

2・1 Phase field 変数 一般的な PF 法で用いる phase field 変数 ϕ は、図 1 (a) に示すように、ある相内で一定値を取り、界面において滑らかに変化する。例えば、凝固問題の場合、液相内で $\phi=0$ 、固相内で $\phi=1$ などと定義し、固液界面を $0 < \phi < 1$ の領域と考える。また、多相問題や多結晶粒成長問題では、phase field 変数を複数用いた Multi-phase-field (MPF) 法が多く用いられている。この場合、 i 番目の相もしくは粒内において $\phi_i = 1$ 、他の相もしくは他の粒内において $\phi_i = 0$ 、 i 番目の相もしくは粒の異相界面もしくは粒界において $0 < \phi_i < 1$ となるよ

うな phase field 変数を用いる。今日では、PF 法および MPF 法は、多くの物理・化学・工学的な問題に応用されているが、phase field 変数の考え方は基本的に同じである。

Phase-Field-Crystal (PFC) 法は、上記のような一般的な PF 法と phase field 変数の定義が異なる。図 1 (b) に PFC 法で用いる phase field ϕ の界面近傍におけるプロファイルを示している。液相内では通常の PF 法と同様、一定値 $\phi = \phi_0$ ととるが、固相内では原子 1 つに対して phase field 変数の 1 周期が対応する。

2・2 自由エネルギー汎関数と相図 以上のように定義された phase field ϕ を用いて自由エネルギー汎関数を構築する。固相内における ϕ の周期構造によってエネルギーを最小化するように、つまり ϕ の勾配が存在するとエネルギーを減らすように $-\left|\nabla\phi\right|^2$ を導入する。しかしながら、この項だけでは勾配が無限大になってしまうため、1 つ高い次数を有する $\left|\nabla^2\phi\right|^2$ を用いる必要がある。さらに、1 次相転位を表現するためにダブルウェル関数 $f_d(\phi)$ を導入する。以上より、PFC 法の自由エネルギー汎関数は以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} F &= \int_V \left(f_d(\phi) - a_3 |\nabla\phi|^2 + a_4 |\nabla^2\phi|^2 \right) dV \\ &= \int_V \left(f_d(\phi) + a_3 \phi \nabla^2\phi + a_4 \phi \nabla^4\phi \right) dV \\ &= \int_V \left\{ f_d(\phi) + \phi (a_3 \nabla^2 + a_4 \nabla^4) \phi \right\} dV \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 a_3 と a_4 は正の定数であり、式の変形過程において部分積分とガウスの発散定理を用いている。式 (1) の具体形として、最も基本的な形である次の Swift-Hohenberg モデルを用いる。

$$F = \int_V \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2 + \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{\phi}{2} (1 + \nabla^2)^2 \phi \right] dV \quad (2)$$

ここで、 α は温度に比例する係数である。

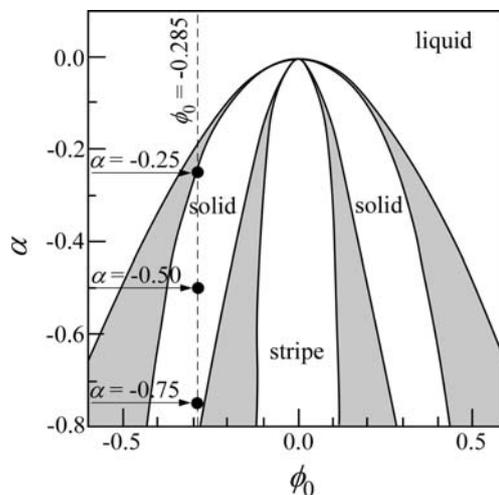


Fig. 2 Phase diagram

式(2)より, ϕ の平均値 ϕ_0 と α の関係として, 図2のような相図を描くことができる. グレーの領域は各相の共存領域である.

2・3 時間発展方程式 Phase field 変数 ϕ は保存量であるので, Chan-Hilliard 方程式より次式の発展方程式を得ることができる.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} = \nabla^2 \left[\alpha \phi + \phi^3 + (1 + \nabla^2)^2 \phi \right] \quad (3)$$

3. シミュレーション

3・1 α の影響評価 図2中に示す3種類の α を用いて単結晶の変形シミュレーションを行う. α は温度を表す係数であり, 負側に大きくなるほど温度は低下する. 図3左図は用いた解析領域 (150×150 FD lattices) と初期 phase field プロファイルを示している. 図3右図は, 10% ($\varepsilon=0.1$) まで x 方向に引張りシミュレーションを行った際の応力-ひずみ曲線を示している. この場合, 非常に小さい完全結晶に対して拘束の強い変形シミュレーションを行っているため, 転位などの欠陥は生じず, ほぼ弾性的な応答を示した. しかしながら, α の影響は非常に顕著に応力-ひずみ関係に現れていることがわかる.

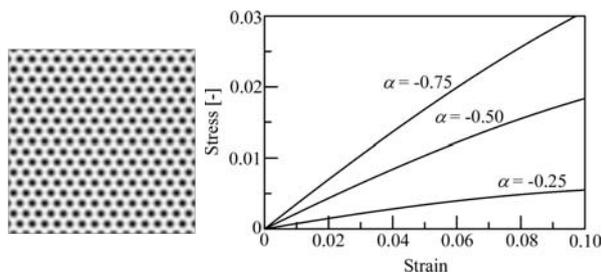


Fig. 3 Phase field profile (left) and stress – strain curves (right)

3・2 2結晶変形シミュレーション 図4(a)に示す2結晶もでる(300×300 FD lattices)を用意し, x 方向への引張りシミュレーションを行う. ここで, $\alpha = -0.5$ としている. 図4(b)(c)(d)は, それぞれ $\varepsilon = 0.06, 0.07, 0.08$ 時の変形組織を自由エネルギー

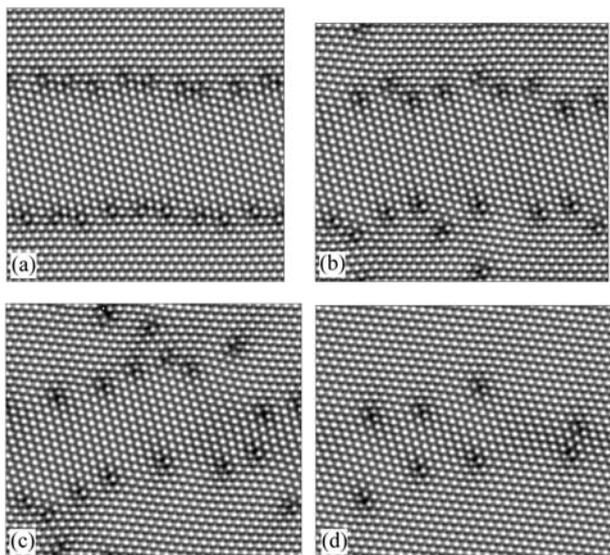


Fig. 4 Microstructures at $\varepsilon =$ (a) 0.00, (b) 0.06, (c) 0.07 and (d) 0.08

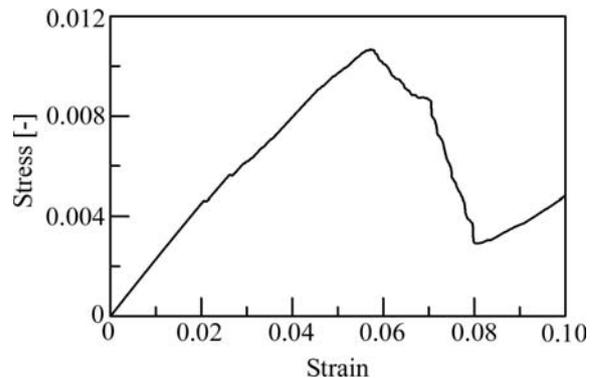


Fig. 5 Stress-strain curve corresponding to the results of Fig. 4

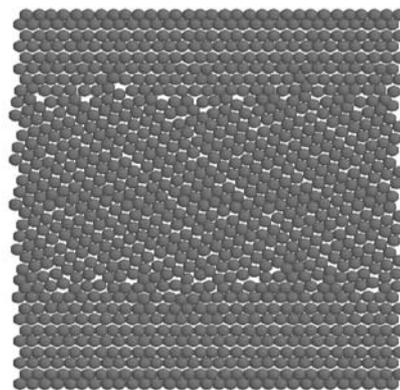


Fig. 6 Atomic arrangement formed from Fig. 4 (a) for MD simulation

一分布として表している. また, 図5は対応する応力-ひずみ曲線である. 荷重を負荷すると, 始め微視構造に大きな変化は見られず, 応力は単調に増加する. $\varepsilon = 0.06$ あたりになると粒界を構成していた転位が上下の粒内にすべり面に沿って移動し, 局部的な回転を誘発させることで, 2結晶間の方位差を小さくしようと寄与する. さらに変形が加わると, 転位は中央の粒内にも進入し, 解析領域全体において単結晶化が生じていることがわかる. 図5の応力-ひずみ関係は, 上記のような転位の挙動を反映した結果となっている. 弾性領域のひずみが非常に大きい, 粒界からの転位の生成や, すべり面に沿った転位の移動や消滅など, 転位挙動を良く再現できている.

図6は図4(a)の初期 phase field プロファイルから作り出した MD シミュレーションで用いる原子構造である. この場合, phase field プロファイルの局大値に原子を置くことで原子構造を形成している. 図6のモデルを用いて2次元 MD シミュレーションを試みたが, 非常に早い段階で粒界にポイドが発生し, PFC シミュレーションと比較できるような良好な結果を得ることができなかった. 詳細は講演会当日に報告する.

参考文献

- 1) K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 245701.
- 2) T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, Comp. Mater. Sci. 44 (2009) 1192.
- 3) T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita, submitted to Int. J. Mech. Sci. (2009).