

Phase Field Crystal 法による結晶粒界の特性解析

神戸大学 [院]
神戸大学

廣内 智之
富田 佳宏

神戸大学 高木 知弘

1 緒 言

実際の材料の物理化学的特性は、材料の微視組織が有する欠陥に強く影響されることが知られている。そのため、材料の更なる高機能化および新機能発現のためには、材料の微視組織に依存する巨視的な材料特性評価を可能とする数理モデルの構築が必要不可欠である。

現在、材料の力学的特性の評価手法として、有限要素法 (FEM) と分子動力学法 (MD) が広く用いられている。しかしながら、それぞれが対象としている時間と空間のスケールには大きな隔りがあり、その中間的なメゾスケールの評価手法は確立されていない。そのため、MD と FEM の中間的な領域の評価を可能とするマルチスケールモデルの構築が必要とされている。

本研究では、空間スケールが原子の格子間隔に対応しながら、MD よりも大きな時間間隔をとることのできる Phase Field Crystal (PFC) 法⁽¹⁾ を用いて、多結晶凝固時に形成される結晶粒界を再現し、粒界の特性解析を行い、PFC 法の材料評価手法としての適用性を検討することを目的としている。

2 Phase Field Crystal 法

従来 Phase field 法は、異相界面を秩序変数 phase field ϕ の変化領域として表し、 ϕ が 0 や 1 の定常値をとるときに自由エネルギーが極小値をとるように自由エネルギー汎関数を構築する。一方、PFC 法は、単結晶中の原子配列のような周期状態を表すために、秩序変数が周期的な値をとることが大きな特徴であり、従来の手法と大きく異なる点である。本手法にて用いる秩序変数 ϕ は、時間平均化された原子の数密度を表しており、保存場である。図 1 に示すように、固相領域においては原子の周期構造を表現するため、 ϕ は周期的な値をとり、液相領域においてはランダムな原子の配置を時間的に平均化して一定値としている。また、二つの領域に挟まれている領域を界面としている。

ここで、この秩序変数を用いた結晶の周期構造を表す最も基本的な自由エネルギー汎関数を以下に示す。

$$F = \int dV \left[\frac{\phi}{2} (\alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2) \phi + \frac{u}{4} \phi^4 \right] \quad (1)$$

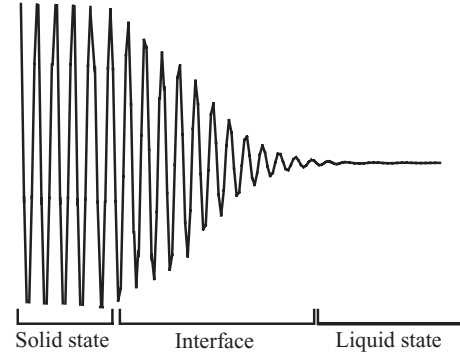


Fig. 1. Phase field profile in PFC.

秩序変数を保存場として与えた PFC 時間発展方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 [(\alpha \Delta T + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2) \phi + u \phi^3] \quad (2)$$

ここで、 $\alpha \Delta T$ は駆動力、 u 、 λ 、 q_0 は平衡状態時の物質に依存するパラメータ、 Γ は ϕ のモビリティである。ついで、式 (1) より解析的に、1 次元、2 次元の自由エネルギーの最小値が求められる。

$$F_{1d} = \frac{-(\alpha \Delta T)^2}{6u} + \frac{1}{2} (\lambda q_0^4 - \alpha \Delta T) \phi_0^2 - \frac{5}{4} u \phi_0^4 \quad (3)$$

$$F_{2d} = \frac{-(\alpha \Delta T)^2}{10u} + \phi_0^2 \left(\frac{1}{2} \lambda q_0^4 + \frac{7}{50} \alpha \Delta T - \frac{13}{500} u \phi_0^2 \right) + \phi_0^2 \sqrt{-u \left(\frac{15 \alpha \Delta T}{\phi_0^2} + 36u \right)} \left(\frac{4}{75u} \alpha \Delta T + \frac{16}{125} \phi_0^2 \right) \quad (4)$$

ここで、 ϕ_0 は平均密度である。

次に、 $u = 1$ 、 $\lambda = 1$ 、 $q_0 = 2/\sqrt{3}$ とパラメータを仮定することで、図 2 に示すような 2 次元平衡状態の相図が得られる。相図の各相に対応する $\alpha \Delta T$ と ϕ_0 を用いて解析することで、図 3 に示すような stripe 状と triangle 状の周期構造を表現することができる。また、uniform は液相状態を表している。次項で示す数値解析では、この相図に基づいて triangle 状の周期構造を得るために、 $(\alpha \Delta T, \phi_0) = (-0.25, 0.285)$ としている。また、 $\Gamma = 1$ とする。

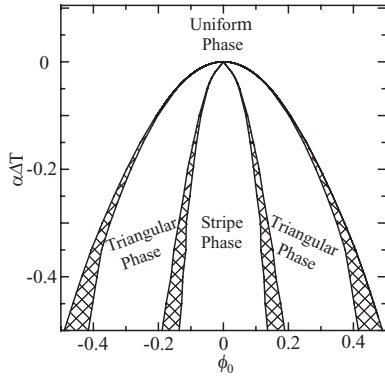


Fig. 2. Phase diagram of two dimensions.

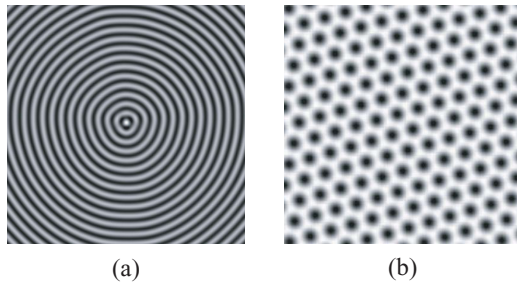


Fig. 3. (a) Stripe phase. (b) Triangular phase.

3 粒界形成シミュレーション

凝固シミュレーションにより直線粒界を形成させ、粒界における phase field プロファイルおよび方位差に依存する粒界エネルギーを評価する。図 4 に解析モデルを示す。160π × 160π の正方形解析領域を 640 × 640 の差分格子で分割する。境界条件は、全方向周期境界条件を適用する。数値解析手法は、時間に関しては前進差分を用い、空間に関しては”Spherical Laplacian Approximation”⁽²⁾を用いる。

図のように、結晶方位の異なる二種類の固相領域を配置する。配置した固相領域同士が影響を及ぼし合わないように、二つの領域の間に、10 × 640 の液相領域を配置し、 $\phi = \phi_0$ とする。この初期状態で凝固を進ませ、二つの固相領域の衝突によって結晶粒界を形成させる。方位 A を常に固定し、方位 B を変化させることで、様々な方位差をともなう結晶粒界の形成を可能としている。

図 5 に、形成された結晶粒界を示す。(a) が方位差 $\theta = 13^\circ$ の粒界を示し、(b) が $\theta = 30^\circ$ の粒界を表している。(a) では、図中の四角い黒枠で表すように、直線上に転位が一定間隔で形成されていることが分かる。これは、低角粒界を再現していると考えられる。一方、(b) では、一本の直線上に phase field の分布が連続的に乱れた領域が観察できる。こちらは、高角粒界を再

現していると考えられる。

粒界エネルギーに対する計算方法と結果に対する考察は、講演当日に発表する。

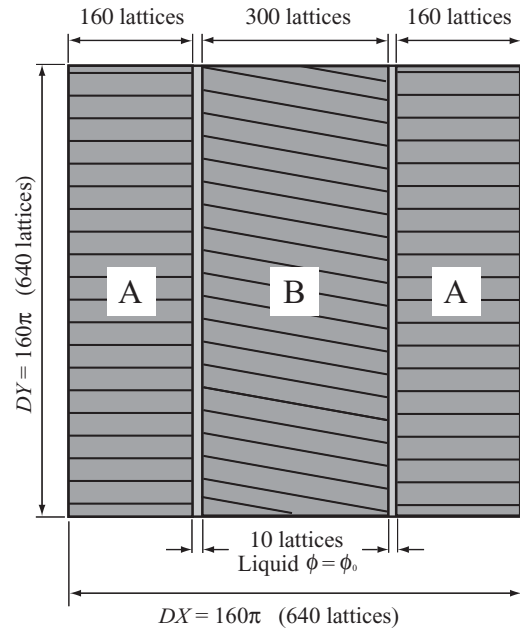


Fig. 4. Computational model.

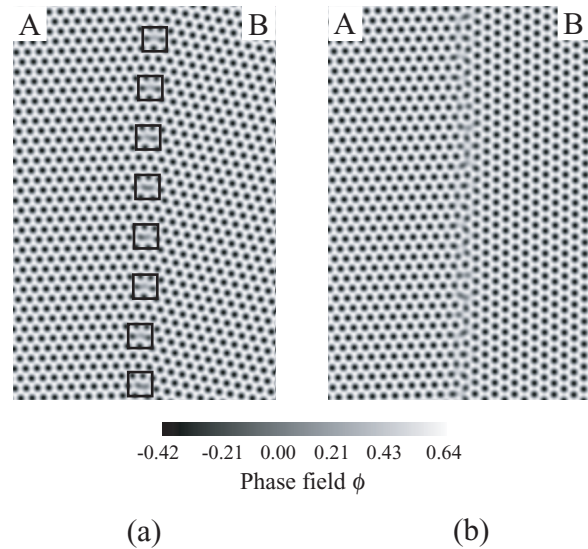


Fig. 5: Phase field profiles at grain boundary for (a) $\theta = 13^\circ$ and (b) $\theta = 30^\circ$.

参考文献

- (1) K. R. Elder and M. Grant, Phys. Rev. E **70**, 051605 (2004)
- (2) Y. Oono and S. Puri, Phys. Rev. A **38**, 434 (1988)