

合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算 —大規模分子動力学法による高温物性値の導出と固液界面挙動解析—

東大¹, 京工繊大², 北大³ 澁田靖¹, 高木知弘², 大野宗一³

合金材料の更なる高機能化・高品質化を達成するため、製造プロセス初段階の凝固過程における材料組織の高精度制御が強く求められている。しかし凝固現象はダイナミクスを直接観察することが難しいこと、流動・伝熱・溶質拡散等のマルチ・フィジックスが関与ことから、凝固組織を制御することは大変困難である。よって凝固現象理解のためのシミュレーション研究も盛んであるが、当該分野における強力な手法であるフェーズフィールド・モデルが現状で扱えるシステム・サイズは、デンドライト数本のレベルに限定される。一方、凝固組織制御の主眼は、デンドライト間の相互作用とその統計的挙動にあるため、シミュレーションの大規模が不可欠である。本特別支援課題では、フェーズフィールド・モデルによるデンドライト組織形成の大規模シミュレーションを実行し、デンドライト集団の競合過程（規則性、淘汰則、偏析挙動）の解明を試み、合金の凝固組織に対する高精度制御法の発展を目指している。具体的には

- (1) 分子動力学法(MD)による原子レベルの凝固現象の解析と高温物性値の算出（澁田）
- (2) フェーズフィールド・モデルの高精度化（大野）
- (3) フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化（高木）

の三つの課題に取り組んでいる。今回の発表では、全体の概要及び(2), (3)の進捗を説明した後、(1)の内容について紹介する。具体的に(1)では、100原子程度のMD法解析により純鉄凝固核の異方性発現過程を解析し、固液界面エネルギーや界面キネティクス係数などの高温物性値及びその方位異方性の直接導出を試みている。計算は領域分割法によるMD法アルゴリズムをCUDAにより開発、GPUに実装、GPU搭載計算機を用いて数値解析を行っている。手法の詳細は文献[1,2]を参照されたい。図1に{100}面及び{110}面で切り出されたbcc結晶(固相核)を液相中に配置し融点以下(過冷度300K)に保持して得られた凝固核を示す。また図2にその凝固核半径の方位依存性を示す。固相核は{100}面方向に優位に成長し4回対称の異方性形状が確認できる。本研究により金属系古典MD法解析において100万原子程度以上の容易に取り扱えるようになり、曲率を持った界面やその異方性など、これまで取り扱いが困難であった凝固核の異方性発現過程を直接解析できるようになった。MD法解析から導出される固液界面エネルギー及び界面キネティクス係数をフェーズフィールド・パラメータと対応させ、フェーズフィールド・シミュレーションと原子スケール解析とを正しく関連付けることが本研究のねらいの一つである。

[1] Y. Shibuta et al. ISIJ Int. **52**, 2205 (2012).

[2] 小口・澁田・鈴木, 日本金属学会誌, **76**, 462 (2012).

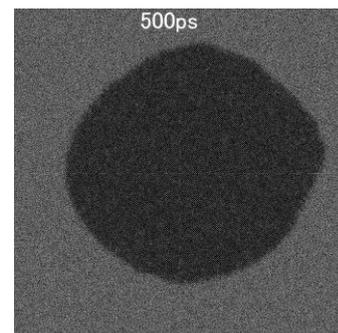


Fig. 1 Snapshot of solid nucleus with anisotropy with four-fold symmetry.

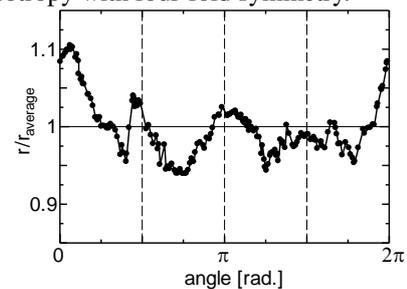


Fig. 2 Radius anisotropy in solid nucleus.