

放射光によるその場観察と大規模シミュレーションによる合金凝固現象の解明

北大¹、京工繊大²、東大³、京大⁴、大野宗一¹、高木知弘²、澁田靖³、安田秀幸⁴
mohno@eng.hokudai.ac.jp

合金材料の多くは casting・凝固プロセスによって製造され、材料の高機能化・高品質化を達成するために、凝固組織を高精度に制御することが求められている。合金の凝固現象には、流動・伝熱・物質拡散・変形などの複数の物理現象が関与し、それぞれの物理現象に固有の特性長さは一般に数桁異なる。つまり、合金凝固の組織形成は、複数の不均一場の時間発展が広範囲の時空スケールにわたって関与する問題であり、そのことが凝固組織の多様性を生むとともに、現象解明と組織制御の難しさの原因にもなっている。特に、合金凝固の直接観察の難しさが、本分野の進展に大きな障害となっていた。ところが、近年、その場観察技術の発展が目覚ましく、SPring-8の放射光 X 線イメージング技術によって、鋼を初めとする多くの合金の凝固現象が直接観察され、従来想定もされていなかった新しい知見が次々に明らかにされている[1]。一方で、凝固科学の発展の一翼を担ってきた組織形成シミュレーションの進展も目覚ましく、近年の著しい高精度化・大規模化によってシミュレーションの適用範囲が拡大している[2]。

フェーズフィールド・モデルは dendrite 組織の形成過程を記述する強力な計算モデルとして発展してきたが、計算コストが高いため、対象とできるシステムサイズが dendrite 数本程度に限られてきた。また、インプットパラメーターである高温物性値（固液界面エネルギーや動力係数等）の実測値や計算値が欠如していることから、実用材料の凝固現象を定量的にシミュレートすることが従来困難であった。本研究では、組織形成の高精度解析のための方法論の発展と dendrite 集団の競合成長過程の解明を目的として、分子動力学法(MD)による凝固現象の高温物性値の算出及び凝固現象の原子論的理解、dendrite の高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデリング、そして大規模フェーズフィールド・シミュレーションを実施した[2]。そして、dendrite 競合成長の大量計算から、100 本以上の dendrite 間の競合成長のシミュレートに成功し、凝固組織制御に関わる重要な知見を得た。例えば、一方向凝固において、熱流方向と結晶の優先成長方位が一致している dendrite が優先的に成長することが従来想定されてきたが、本解析において、熱流方向に対して優先成長方位がある程度傾きを持って成長していても、1 次 dendrite アーム間隔の調整機構との兼ね合いで、他の dendrite を淘汰しえることが示され、dendrite 淘汰則の新たな一面を浮き彫りにした。

ここで特筆すべきは、現在、スパコンを駆使した大規模シミュレーションによって解析できる現象の時空スケールが、SPring-8 によるその場観察と同じスケールにまで達していることであり、両者の直接比較による精度・妥当性の検証はもちろんのこと、例えば、両最先端技術とデータ科学を組み合わせることで、凝固中の相の状態推定や高温物性値の推定等、今までにない新しいアプローチの発展が期待される。本発表では、最新の大規模計算を紹介するとともに、その場観察との連携について議論する。

[1] H. Yasuda, et al. : IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng., **33**, 012036 (2012).

[2] Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki: JOM, **67**, 1793 (2015).