

原子・組織レベルの凝固・粒成長プロセスの大規模シミュレーション

澁田靖：東大・工

高木知弘：京工織大，大野宗一：北大・工

S.K. Deb Nath・毛利哲夫：東北大金研

構造材料の製造プロセスにおいては多種の相変態が生じ，それに応じて多様な材料組織が形成する．高品質・高性能な構造材料の開発のために，その各段階の材料組織の形成過程を理解し，高精度に制御することが求められている．特に，高温プロセスである凝固組織の形成とそれに続く結晶粒成長は実験技術のみでは一般に観察や解析が難しい現象であるため，実態解明のために計算科学的手法の発展と応用が望まれている．発表者らは，凝固とそれに続く結晶粒成長における材料組織の時間変化過程をフェーズフィールド・モデルと分子動力学法（MD）の大規模計算によって明らかにすべく，主に大規模 MD シミュレーションによる材料組織の物性値算出[1]と原子レベルの凝固・粒成長過程の解明[2]，大規模フェーズフィールド・シミュレーションに用いる高精度フェーズフィールド・モデルの開発[3]，大規模フェーズフィールド・シミュレーションによるデンドライト組織の形成過程と多結晶粒組織の時間変化過程の解明[4]に取り組んできた．本発表ではこれら最先端の研究結果を紹介するとともに，超大規模シミュレーションに立脚した材料プロセス研究の現状と展望について議論する．

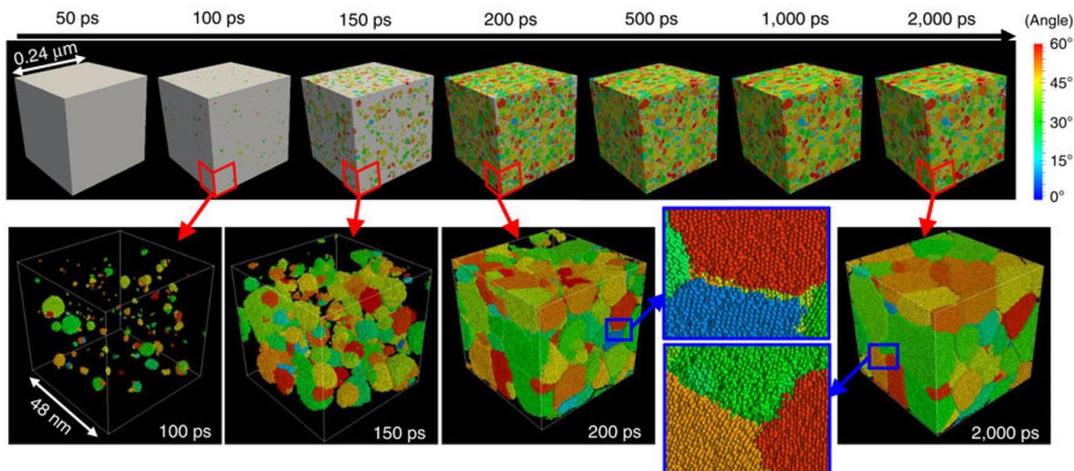


図 1 純鉄過冷却融液からの均質核生成・凝固過程の超大規模分子動力学シミュレーション (1,0400,000,000 原子)[1]

参考文献

- [1] S.K. Deb Nath, Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, T. Mohri; ISIJ Int. **57**, 1774 (2017).
- [2] Y. Shibuta, et al.; Nature Communications, **8**, 10 (2017).
- [3] M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta; Phys. Rev. E, **96**, 033311 (2017).
- [4] E. Miyoshi et al; npj Computational Materials, **3**, 25 (2017).

関連 web

<http://www.mse.t.u-tokyo.ac.jp/> (東大・マテリアルモデリング研究室)

<http://www.cmd.kit.ac.jp/> (京都工芸繊維大学・数値材料デザイン研究室)