

フェーズフィールド法とは

フェーズフィールド法とは合金などの固体内での組織の挙動を熱力学をベースに 組織の形成過程のダイナミクスをシミュレーションするもので、相変化や析出現象を解析する手法です。

物質を形成するプロセスで 温度や圧力を管理することで非常に優れた特性を示す物質を作り出すことができます。それを決定する重要なファクターの一つとして物質を形成する相 (Phase) の間の幾何学的関係があります。

ここで 相と相の境界のダイナミクスは、隣接する相間の自由エネルギー、弾性エネルギーなどにより決定され、それは相のフロントが進行する速度、相境界の曲率の間に成立する関係を満たしながら時間発展していくと見ることができます。

このようにして時間発展した結果得られる相の幾何学的特質をあらゆる条件でコンピュータにより計算予測し 実際の物質設計のためのツールとして役立てることが出来ます。ここで得られる知見はナノスケールの構造の材料設計には有力なものです。

このように 本方法は凝固過程や固相結晶成長、相変態などの界面移動を伴う現象の解析及びそれを応用する材料設計に用いられるものです。

弊社コードは P.H.Leo や L.Q.Chen らによる弾性歪場モデルを組み込みました。ここでは下記の物理量を考慮しております。

- ・自由エネルギー と 相変化
- ・元素の拡散
- ・弾性歪場

この計算により 析出相の形状は結晶方位に依存しながら規則的に配列する事や 外部からの不純物侵入による挙動等の知見を得る事ができます。