モンテカルロ法を活用した平衡状態図と 変態組織形成のシミュレーション

松 宮 徹*

1. 緒 言

材料科学においてモンテカルロ法は大きく2通りの活用方法がある。一つは熱力学平衡状態にある系の統計力学的集団を創出する方法として、もう一つは遷移現象の確率論的シミュレーションの方法としての活用である。ここでは、前者の例として状態図のシミュレーションを、後者の例として再結晶・変態組織形成のシミュレーションを取りあげる。

熱力学データベースを用いた状態図のシミュレーションでは、系全体の組成、圧力、温度が与えられた時に、系全体の自由エネルギーが最小になるにはどの相がどんな組成でどんな割合で組合せられればいいのかを計算する⁽¹⁾。そこでは、各相の持っている自由エネルギーが組成、温度、圧力の関数で既知であることが前提であり、また、相の存在が予め分かっているという限界がある。一方、ここで紹介する方法では、原子間の相互作用が分かれば、原子の配列のエントロピーが最大になる統計力学的集団を創出するので、計算の結果としてどんな相が存在しているのかが分かる。つまり、計算の前には未知であった相も発見できるのである。

材料の変態組織形成の数学的解析は巨視的には拡散律速型変態について拡散方程式と変態界面での熱力学平衡解析とを組合せてなされる⁽²⁾。しかしながら、この枠組みでの解析は組織のサイズ、形態の予測については殆ど無力である。組織のサイズ、形態を予測するには、温度、溶質の拡散場の解析に併せて、界面エネルギーを考慮して核形成、成長を解析することが要求される。原子論的な立場からは、原子一つ一つ

の動きを計算する分子動力学法により、これらの因子をすべて考慮して組織の形成をシミュレーションすることは原理の上では可能であるが、シミュレーションできる空間、時間の制約から、とても現実的な方法とは言えない。一方、素過程の確率論的施行で現象をシミュレーションするモンテカルロ法は、現象内の素過程をどのように選ぶかにより、巨視的なシミュレーションから原子レベルの微視的なシミュレーションまでカバーできるメソスコピックなシミュレーション法として着目される。

2. 平衡状態図のシミュレーションの方法

Cu-Au 2 元系のシミュレーションを例にとって説明する。この系の面心立方晶の規則相と不規則相の安定領域を調べるため、面心立方構造を持った立方体のシミュレーションセルを用意し、各格子点に Cu あるいは Au いずれかの原子を初期条件として配置させる。次に、各格子点における原子の種類を変更する試行を行う。系全体の持っているエネルギーを E とし、Cu, Au の原子数および化学ポテンシャルを n_i, μ_i とし、この原子変更(A 原子から B 原子への変更とする)による $E - \sum n_i \mu_i$ の変化が負の場合はこの原子変更を無条件に認め、正の場合には 0 から 1 の間に一様に分布する乱数から一つ R を無作為に選び、 $R < \exp \{ -\Delta(E - \sum n_i \mu_i) / kT \}$ であればこの原子変更を認め、そうでなければ変更を認めず、もとの原子のままにしておく。ここに、 k はボルツマン定数、 T は絶対温度を表す。この試行を全格子点について行うのを 1 モンテカルロステップ(MCS)と呼ぶ。

これを何千、何万 MCS と繰り返した後に、系は平衡状態

* 新日本製鐵株式会社先端技術研究所解析科学研究部長(〒211 川崎市中原区井田1618)

Simulation of Phase Diagram and Transformation Structure Evolution by the Use of Monte Carlo Method; Tooru Matsumiya (Advanced Technology Research Laboratories, Nippon Steel Corporation, Kawasaki)

Keywords: Monte Carlo simulation, phase diagram, transformation, grain growth, recrystallization

1996年4月1日受理

に達する．この時ある格子点の原子が A 原子あるいは B 原子が位置するかが異なっているだけで，他の格子点の原子の配置が全く同じである二つの状態を状態 1 および 2 とし，それらが現れる頻度をそれぞれ P_1, P_2 ，状態 1 から状態 2 へ移る確率を P_{12} ，状態 2 から状態 1 へ移る確率を P_{21} とすると，以下の平衡関係が成り立つ．

$$P_1 \cdot P_{12} = P_2 \cdot P_{21} \quad (1)$$

したがって，次式が成り立ち，

$$P_1/P_2 = P_{21}/P_{12} \quad (2)$$

上述した原子変更の試行の方法から以下の関係が導かれる．

$$\begin{aligned} P_1/P_2 &= 1/\exp \{ -\Delta(E - \sum n_i \mu_i)/kT \} \\ &= \exp \{ -(E - \sum n_i \mu_i)_1/kT \} \\ &\quad / \exp \{ -(E - \sum n_i \mu_i)_2/kT \} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで下添え字は状態 1, 2 を示す．この関係はいずれの状態間にも導かれるので，結局，どの原子配列の状態もそれぞれの $(E - \sum n_i \mu_i)$ のボルツマン因子に比例する頻度で現れることを意味する．すなわち，グランドカノニカル集団を創出している．内部エネルギー E の計算の仕方は後述するが，以上の計算では，化学ポテンシャルの相対値，温度を入力条件とし，計算結果として組成と原子配列が計算される．

内部エネルギー E は原子間の相互作用エネルギーから計算する．ここでは第一原理バンド計算を用いて求めた全エネルギーをクラスター変分法により多体相互作用に分解したものを適用する方法を述べる．

Cu, Au 2 元系の純系および規則相の 5 つの相について計算したエネルギーを E_i とする． E_i は相関関数 ξ_{ij} を用いて，次のように多体相互作用に関係づけられる⁽³⁾．

$$E_i = \sum \xi_{i,j} V_j \quad (4)$$

ここで， $V_0 \sim V_4$ は，基準のエネルギー，原子の種類によるポイントエネルギー，最近接原子間の 2 体，3 体，4 体相互作用エネルギーを表す． $\xi_{i,j}$ は Cu, Au に擬スピンパラメータ σ としてそれぞれ 1, -1 を与えて，多体相互作用を求める格子点上の σ の積の平均値から計算される．

$$\xi_{i,j} = \sum \sigma_1 \cdot \sigma_2 \cdots \sigma_j / N \quad (5)$$

総和は相 i における N 個の j 体クラスターに亘ってなされる．例えば， $L1_0$ 構造の規則相では図 1 に示すように Cu 原子 2 個と Au 原子 2 個からなる正 4 面体が構成単位であり，2 体相互作用の組合せはその 6 つの稜であり，擬スピンパラメータの積は 1 が 2 つ，-1 が 4 つでそれらの平均は $-1/3$ になり， $\xi_{2,2} = -1/3$ となる．また $Cu_3Au(L1_2)$ では Cu 原子 3 個と Au 原子 1 個の 4 面体が単位となるので，2 体相互作用の擬スピンパラメータの積は 1, -1 それぞれ 3 個ずつであるので，平均は 0 となり， $\xi_{1,2} = 0$ である．それらの計算結果は表 1 に与えられる．式(4)を連立して解いて， V_j を求める．図 2 に寺倉ら⁽⁴⁾が計算した Cu-Au 系の原子間相互作用エネルギーを示す．それらは格子定数によって変わる．

ある格子点の Cu から Au への原子変更に伴う内部エネルギー変化 ΔE は，この格子点の原子種を変えることによって，この格子点を含む 8 つの 4 面体クラスターのエネルギー

図 1 $L1_0, L1_2$ 構造の原子配列．

表 1 相関関数．

i		$\xi_{i,0}$	$\xi_{i,1}$	$\xi_{i,2}$	$\xi_{i,3}$	$\xi_{i,4}$
0	A(FCC)	1	1	1	1	1
1	$A_3B(L1_2)$	1	1/2	0	-1/2	-1
2	$AB(L1_0)$	1	0	-1/3	0	1
3	$AB_3(L1_2)$	1	-1/2	0	1/2	-1
4	B(FCC)	1	-1	1	-1	1

図 2 Cu-Au 2 元系における原子間相互作用エネルギー．

ー変化を V_j を用いて計算し，その和から求める．

$$\Delta E = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^4 \{ N_B(i) (\xi_{i+1,j} - \xi_{i,j}) V_j \} / 2 \quad (6)$$

ここで， $N_B(i)$ は当該格子点を含む 8 つの 4 面体のうち，この格子点の他の 3 頂点の i 個を Au 原子が占める 4 面体クラスターの個数を示す．また， V_j は原子 1 個あたりに換算した値を用いており，4 面体クラスター当たり 1/2 個の原子であるので式(6)の末尾に 1/2 がかけられている．

なお，シミュレーションセルと同じ原子配列が 3 方向に周期的に繰り返されているとする周期境界条件を用いる．シミュレーションセル周辺上の格子点の原子とその周りの格子点の原子との相互作用を計算する場合にシミュレーションセ

ル外にある格子点上の原子の配列を知る必要があるが、この周期境界条件によって、反対側の周辺の原子配列からこれを知ることができる。

一方、 $\Sigma n_i \mu_i$ の変化は Cu が 1 個減り、Au が 1 個増すのみであるから、結局 $\mu_{Au} - \mu_{Cu}$ で与えられる。また、図 2 に示すように V_j は格子定数に強く依存し、また格子定数は組成に依存するので、1MCS 毎に系全体の組成を求め、その組成に応じた格子定数を求め、それから V_j を改めて次の MCS の計算に使用する。あるいは、1MCS 毎に格子定数の変化の試行を挿入して体積を最適化する方法も考えられる。

3 元系以上 Q 元系のシミュレーションではある格子点の原子種を元の原子も含めてすべての原子種 q に変更した場合の $E - \Sigma n_i \mu_i$ の変化 $\Delta q(E - \Sigma n_i \mu_i)$ のボルツマン因子をそれぞれの原子種への変更の確率として、変更後の原子種を選ぶ。具体的には、(0, 1) 区間にそれぞれの確率に等しい区間を割り振り、一方で (0, 1) に一様に分布する乱数から一つを無作為に選んで、その値がどの区間に落ちたかによって原子種を決める。この方法でグランドカノニカル集団が得られる。2 元系でもこの方法を用いてもよい。この方法でも $P_{12}/P_{21} = \exp \{-\Delta(E - \Sigma n_i \mu_i)/kT\}$ が変わらないので、 P_1/P_2 も同じであり、グランドカノニカル集団を生成する。この場合、 $\Delta(E - \Sigma n_i \mu_i)$ が負であっても無条件に原子変更を認めるのではなく、この変更が次の MCS で逆戻りする可能性を予見して、制限を加えていることを意味している。相殺される無駄な変更が繰り返されるのを防ぐ効果がある。

3. Cu-Au 状態図のシミュレーションの具体例

3 方向ともに格子点 4 点を含む面心立方格子を 24 個ずつ並

べ、合計 $24^3 \times 4$ 点の格子点からなるシミュレーションセルを用いて、計算を行った。図 3 に初期の原子配置を $L1_0$ の配列とし、MCS が増えるにしたがって変化する原子配列の様子の例をある 2 原子層の種類別された格子点サイト毎に示した。T=800 K では MCS が増すにつれ、逆位相界面をもつ $L1_2$ 相が現れる。逆位相界面が存在することはエネルギー的に不利であるので、逆位相界面は MCS がさらに増すにつれて滑らかになり、消えていくことが分かる。一方 T=1200 K では MCS が増すにつれ、原子の配列は次第に不規則になり、規則相は現れないことが分かる。初期条件を規則相および不規則相のどちらに取っても同じ最終結果が得られる。得られた相が規則相かどうかは、規則度パラメータを定義してその挙動をモニターすることでさらに明確になる⁽⁵⁾。

温度および $\Delta\mu$ を種々取り替えた条件下で得られた平衡状態をマップ化することにより状態図が描ける(図 4)。計算された規則不規則遷移温度は実測値に比べて数 100 K 高い。このことは、毛利らが指摘しているように、Cu-Au 系のように原子サイズの非常に異なる 2 原子が不規則に混合している場合には実際は原子の位置が完全結晶の格子点位置から大きく緩和しているにも拘らず、これを無視した計算では不規則相のエネルギーが高めに計算され、その結果、規則相が実際よりも相対的に安定した結果によるものと考えられる⁽⁶⁾。格子緩和を取り入れた解析はまだ試行段階である⁽⁷⁾。

4. 再結晶・変態組織形成のシミュレーションの方法

面心立方構造をもったシミュレーションセルを用意し、各格子点ごとにそれが位置する結晶粒の相の種類と結晶方位を

図3 原子配列の変遷(上段: T=800 K, 下段: 1200 K).

図4 Cu-Au 状態図計算結果.

図5 粒成長のモンテカルロシミュレーションにおける格子点の結晶方位変更の試行の概念図.

識別する整数値を背番号として与える. すなわち, 隣接する格子点と同じ背番号を持っているならば, それらの格子点は同じ結晶粒に属していることを意味するし, もし, 異なる背番号を持っているならば, それらは異なる結晶粒に属していることになるので, それらの間には結晶粒界または異相界面が存在することを意味する. 1MCS の間に, すべての格子点について, その背番号を他の番号へある確率にしたがって変更していく.

その変更の仕方には3種の方法がある. すなわち, 図5に示すように格子点*i*(図中では*m*点)の背番号を変更するときのエネルギーの変化 ΔE は以下の式で計算されるエネルギー*E*の変化で与えられる.

$$E_i = \sum_j J_{s_i s_j} (1 - \delta_{s_i s_j}) + G_{s_i} \quad (7)$$

ここで, s_i, s_j は格子点*i*およびそれに隣接する格子点*j*の背番号を示し, J は界面エネルギー, G は格子点の体積に相当する自由エネルギーを表す. タイプ1, 2では先ず変更後の背番号の候補を一つランダムに選び, この変更に対して ΔE を計算し, タイプ1では式(8), タイプ2では式(9)の確率 W にしたがって, この背番号への変更を実施するか, あるいは, もとの背番号のままにするかを定める. タイプ3ではすべての背番号への変更を候補とし, 式(10)に示すそれぞれの背番号への変更の確率にしたがっていずれかの背番号に変更する.

タイプ1: $\Delta E \leq 0$ のとき $W=1$

$$\Delta E > 0 \text{ のとき } W = \exp(-\Delta E/kT) \quad (8)$$

$$\text{タイプ2: } W = \exp(-\Delta E/kT) / \{1 + \exp(-\Delta E/kT)\} \quad (9)$$

$$\text{タイプ3: } W_{s_i} = \exp(-\Delta E_{s_i}/kT) / \sum_Q \exp(-\Delta E_Q/kT) \quad (10)$$

ここで, Q は背番号の種類を示す. またシミュレーションセル境界条件としては周期境界条件を用いる. なお, 粒径が数10から数100 μm の粒成長や変態をシミュレーションするにはシミュレーションセルの大きさある程度大きく確保する必要があるので, 格子点の間隔をできるだけ大きく取って, 同じ格子点数で広い領域をカバーできる方向を狙う.

変態組織形成をシミュレーションする場合, 格子点サイズが変態核形成臨界半径に比べて十分小さい場合には, 揺らぎによってある格子点で変態核が生じて, この格子点は周りの格子点との間に大きな界面エネルギーを有するのでエネルギー的に不安定であり次のMCSで元の相に戻ってしまう. すなわち, 古典的核形成理論に含まれる諸因子の影響がモンテカルロシミュレーションのなかにすべて実現される. しかしながら, 格子点のサイズを臨界核半径よりも大きく取ってしまうと, 変態は体積自由エネルギーの寄与が絶大になって, 界面エネルギー生成の障壁もなく変態が進んでしまうことになる. そこで, この問題をなくすためには, 格子点の空間内の変態核形成速度を古典論を用いて計算し, 1MCS内である数値 N_0 を超えた場合に背番号の選択枝に加えると言う思想で, 式(10)の各背番号の選択確率の中で, 変態を意味する背番号の選択については $\exp(-\Delta E_Q/kT)$ に $(I_G + n_{GB} I_{GB}) \Delta t / N_0$ を乗じた確率を適用することが考えられる. ここで, I_G は粒内核形成頻度, n_{GB} は格子点の境界面のうち粒界である面数, I_{GB} は粒界での核形成頻度を示す.

5. シミュレーションの具体例

(1) 同一サイズの領域を格子点の数を変えた粒成長のシミュレーション

0.67 nm, 1 nm および 2 nm の格子点間隔で同一領域の粒成長をシミュレーションするため, それぞれ, $120 \times 120 \times 120$, $80 \times 80 \times 80$, および, $40 \times 40 \times 40$ 格子点のセルを用いた. $Q=72$, 粒界エネルギーは 850 mJ/m^2 , 温度は 1200 K とし, タイプ3の過程を用いた. 初期値としては, 各格子点の背番号は任意に与えた. 計算した結果を図6に示す. 平均粒径は MCS 数のほぼ $1/3$ 乗に比例する. 平均粒径を用いた格子点間隔で除して MCS とプロットすると, いずれの場合もほぼ同一曲線に乗ることが分かる.

(2) γ - α 変態のシミュレーション・モデルケース

表2に示す条件で, Q は γ 相について36, α 相について36の合計72を用いた. 結果を図7に示す. 格子点間距離を $1 \mu\text{m}$ に選んだシミュレーションは 10 A を選んだ場合に比べて, 極僅かな MCS 数で変態が進んでいることが分かる. 考察で述べるように, 格子点間距離 $1 \mu\text{m}$ のシミュレーション

図6 シミュレーションセルサイズを一边 80 nm に一定にして、格子点間隔を変えた場合の平均粒径の比較。

での 1MCS は実時間に換算すると、1 nm でのシミュレーションの 1MCS の $10^6 \sim 10^9$ 倍に相当する。

6. 考 察

平衡状態図のシミュレーション方法として述べた方法は、結晶構造を同じにする規則相と不規則相の領域を求める方法に限定される。もちろん、面心立方格子だけではなく、他の結晶構造に対しても、その構造を持った格子点に原子を配列し、全く同様の方法で、その構造を持つ規則相、不規則相間の相図の作成にも適用できる。しかし、もっと一般的に、各種の異なった結晶構造を持つ相をすべて含めて相図を描くには、これらのすべての相の間の安定性を比較しなければならない。そのために諸相の自由エネルギーを求める方法を考察する。

シミュレーションの方法で述べたように、系を構成する元素の化学ポテンシャルの相対値を入力条件として、シミュレ

表2 γ - α 変態のシミュレーションに用いた条件 (J の添え字の 1 は γ 相, 2 は α 相を示す)。

シミュレーション	J_{11}	J_{12}	J_{22}	ΔG	L
原子レベル	3	2	1	6.3	1 nm
メゾスコピック	3×10^6	2×10^6	1×10^6	6.3×10^9	1 μm

(in unit of kT)

ーションした結果、系の組成が算出される。化学ポテンシャルの相対値は自由エネルギー関数 G の微分を与えるし、その微分値を持つ組成を追って積分していくと自由エネルギー関数が原理的には求められることになる。すなわち、2 元系の場合、元素 1 のモル分率を x として、次式が成り立つ。

$$dG/dx(x) = N_{AV}(\mu_2 - \mu_1) \quad (11)$$

ここで、 N_{AV} はアボガドロ数である。 $x=0$ や 1 の近傍では $\mu_2 - \mu_1$ は非常に大きい値を取り、かつ、変化も急であるので、式(11)をそのまま積分すると大きな誤差を伴うので、過剰自由エネルギー分 G^{EX} のみを取り出して積分する方法が現実的である。

$$dG^{EX}/dx = N_{AV}(\mu_2 - \mu_1) - RT \ln \{x/(1-x)\} \quad (12)$$

$\mu_2 - \mu_1$ を適当に選んで計算し、得られた x が一様に分布する結果を得て、式(12)を積分して種々の結晶構造をもつ諸相の自由エネルギーを求めると、後は、従来の熱力学的方法⁽¹⁾で相図を描くことができることになる。

再結晶・変態組織形成のモンテカルロシミュレーションでは 1MCS が実時間にしてどれだけに対応するのかが重要である。格子点間距離として原子間隔を想定した場合は 1MCS は実時間として格子点にある原子が何回かの格子振動の末、隣の格子点に拡散する活性化過程のエネルギー障壁を乗り越える時間間隔、すなわち、単位時間当たりのジャンプ回数 ν の逆数に相当すると考えられる。ジャンプ距離として原子間距離 a 、拡散係数を D として、ランダムウォークを仮定す

図7 γ - α 変態のシミュレーション結果(上: 格子点サイズ 10 A, 下: 同 1 μm)。

図8 粒界移動の模式図.

ると次の関係式が得られる.

$$D = a^2 v / 6 \quad (13)$$

この式に, $D \sim 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, $a \sim 2 \times 10^{-10} \text{ m}$ を代入すると, $1/v$, すなわち, 1MCS は 10^{-9} s であると推定される.

次に, 格子点間距離として数原子間距離を想定した場合を考える. 例えば, モンテカルロシミュレーションにおいて, 図8に示すように大きな結晶粒界上の格子点の背番号がこれらの粒の背番号とも異なっていた場合, この背番号の変更を試行するとこの格子点が結晶粒1とおなじ背番号に変化する場合の粒界エネルギーの減少量は格子点間距離が大きいほど大きく, 式(10)で計算されるこの背番号へ変化する確率はほぼ1に等しい. したがって, 1MCS でこの粒界は $2R$ だけ移動することになり, 粒界移動速度 V は次式で与えられる.

$$V = 2R / \Delta t \quad (14)$$

ここで, Δt は1MCSに対応する実時間であり, $2R$ は格子点間距離を表す. 一方, 粒界移動現象論からは, 粒界を界して接する二つの結晶粒の半径を R_1, R_2 とすると次式が成り立つ.

$$V = 2\sigma m (1/R_1 - 1/R_2) \quad (15)$$

ここで, σ は粒界エネルギー, m は粒界移動度である. これを図8の同じ問題に適用すると, $R_2 = \infty$ であり, $R_1 = R$ であるので, V は以下の式になる.

$$V = 2\sigma m / R \quad (16)$$

式(14)と式(16)とを比較することにより, Δt は次式で与えられることが導かれる.

$$\Delta t = R^2 / \sigma m \quad (17)$$

$\sigma \sim 500 \text{ mJ/m}^2$, $m \sim 2 \times 10^{-15} \text{ m}^4 \cdot \text{J}^{-1} \text{ s}^{-1}$ として, $R \sim 10^{-10} \text{ m}$ まで外挿すると, 再び, $\Delta t \sim 10^{-9} \text{ s} \sim 1/v$ となることが分かる.

式(17)の関係は, 図8に示す非常に特殊な条件下で導かれたものであるが, もし, 2次元の粒成長のモンテカルロシミュレーションや⁽⁸⁾⁽⁹⁾, パーテックスモデルによる解析結果⁽¹⁰⁾が示すように, 平均結晶粒径がMCS数の1/2に比例するならば妥当であると考えられる.

しかしながら, 図6に示す3次元の粒成長のモンテカルロシミュレーションでは平均粒径はMCS数のほぼ1/3乗に比例している. このことは次元に依存するのではかと考え, 2次元空間に取り残された円形の2次元結晶粒の縮小と, 3次元空間に取り残された球形の結晶粒の縮小とをモンテカルロシミュレーションした. その結果は, 2次元結晶粒はその面積減少量がMCS数に比例した⁽¹¹⁾. 半径の減少速度すな

わち粒界移動速度を V とすると, 面積減少速度は $2\pi R V$ と表せるので, この場合には V は $1/R$ に比例し, 式(15), 式(16)と矛盾しない. 一方, 3次元の場合には残留結晶の体積変化はMCS数と比例した⁽¹¹⁾. 体積変化速度は近似的に $4\pi R^2 V$ と表せるので, これが一定であるということは, V が $1/R^2$ に比例することを意味し, 粒界移動速度が式(15)で表せないことを意味する. もし, 式(16)の代わりに V が $1/R^2$ 比例する関係を当てはめると図8の特殊なケースからは Δt は R^3 に比例する関係が導かれる. 図6に示すような一般的な条件下では平均粒径は格子点サイズ R に比例し, MCS数のほぼ1/3乗に比例しているので, Δt が R^3 に比例するなら, これらの異なった格子点サイズを用いたシミュレーション結果は, 平均粒径と実時間の関係では, すべて近い曲線に乗ることになり, 整合する. したがって, 3次元の場合には式(15)とは異なった式で粒界移動速度が記述される可能性がある.

7. 結 言

平衡状態図および変態・再結晶の組織形成のシミュレーションをモンテカルロ法を用いて試みた結果について述べた. 前者は未知の相の存在を計算の結果発見できる可能性を持っているが, 格子緩和の取り扱い, 結晶構造の異なった相に亘る相図のシミュレーションに課題が残る. また, 後者では, 現実的な大きさの領域のシミュレーションがなされるよう, 格子点サイズを大きくしていった場合の問題点を, 1MCSの実時間との対応, 核形成の取り扱いについて検討した. その結果, 3次元の粒成長のシミュレーションでは平均粒径はMCS数の1/3乗に比例すること, 1MCSに対する実時間は格子点サイズの3乗に比例することが推定された. 核形成には古典的核形成理論を併用することを提案した.

文 献

- (1) 例えば, B. Sundman, B. Jansson and J.-O. Andersson: CALPHAD, **9**(1985), 153.
- (2) 例えば, J. Ågren: J. Phys. Chem. Solids, **43**(1982), 385.
- (3) J. W. D. Connolly and A. R. Williams: Phys. Rev., **B27**(1983), 5169.
- (4) K. Terakura, T. Oguchi, T. Mohri and K. Watanabe: Phys. Rev., **B35**(1987), 2169.
- (5) T. Matsumiya, H. Sawada, W. Yamada and A. Nogami: Computer Aided Innovation of New Materials, Ed. by M. Doyama et al., Elsevier Sci. Pub. B. V., North-Holland, (1991), 779.
- (6) T. Mohri: Bulletin of JIM, **28**(1989), 268.
- (7) H. Sawada, A. Nogami, W. Yamada and T. Matsumiya: Mat. Res. Soc. Symp. Proc., **291**(1993), 135.
- (8) M. P. Anderson, D. J. Srolovitz, G. S. Drest and P. Sahni: Acta Metall., **32**(1984), 783.
- (9) Y. Saito and M. Enomoto: Computer Aided Innovation of New Materials, Elsevier, Tokyo, (1991), 809.
- (10) Y. Nagai, M. Enomoto and K. Kawasaki: COMMP93, ISIJ, Tokyo, (1993), 347.
- (11) A. Nogami, T. Matsumiya and Y. Fukuda: Proc. 2nd. Int. Conf. on Grain Growth in Polycrystalline Materials, ISIJ, 1995, to be published.