

物質・材料設計のための仮想実験システム — 耐熱超合金を対象にしたシステムの検証 —

1 G-9

Virtual Experiment System for Materials Design

— An Examination of the Virtual Experiment System about Superalloys —

永田 毅、西川 宜孝、小池 秀耀

株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター

1. はじめに

コンピュータを用いた物質・材料設計は、数値シミュレーションをはじめとして、知識情報処理、ヒューマン・インターフェース、データベース等の様々な要素技術を有機的に統合化して使用することが不可欠である。我々は、物質・材料設計の一連の設計手順をシステム上で実現し、物質・材料設計のための仮想実験が可能となる仮想実験システムのプロトタイプを開発している [1-2]。

開発された仮想実験システムを用いて、Ni 基耐熱超合金を対象に、組成予測、組織構造予測、電子論的材料特性予測等の、ミクロからメゾスケールの一連の材料特性予測計算を行い、仮想実験システムの検証を行った。

2. 仮想実験システム

2.1 仮想実験システムの概要

仮想実験システムは、物質・材料設計に必要とされる一連の作業を支援するために、設計シナリオの記述、設計手順の蓄積、再利用を可能とする「タスクフロー」という新しい概念を導入しており、数値シミュレーション等の解析ツール群、データベース・マネジメント・システムおよび材料特性データベース群、知識情報処理、結果編集ツール群、可視化ツール群、ステアリング・システム、ヒューマン・インターフェース等から構成されている [3]。

2.2 仮想実験システムを用いた材料特性計算

仮想実験システムの解析ツール群（コンテンツ）の開発、収集、整備を行っており、汎用的な材料計算プログラムおよび耐熱超合金設計用プログラム等を、仮想実験システムに組み込んでいる。仮想実験システムは、一連の解析フローをタスクフロー、各計算をタスクとして定義し、各タスクに手法、ツール（プログラム）を関連付ける。計算結果は、可視化、編集、材料特性データベースへの登録が可能である。各タスク間のデータの受け渡しには、材料特性データベースの登録、参照によって実現している。

Takeshi Nagata, Nobutaka Nishikawa, Hideaki Koike

Center for Computational Science and Engineering,

Fuji Research Institute Corporation

2-3 Kandnishiki-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8443

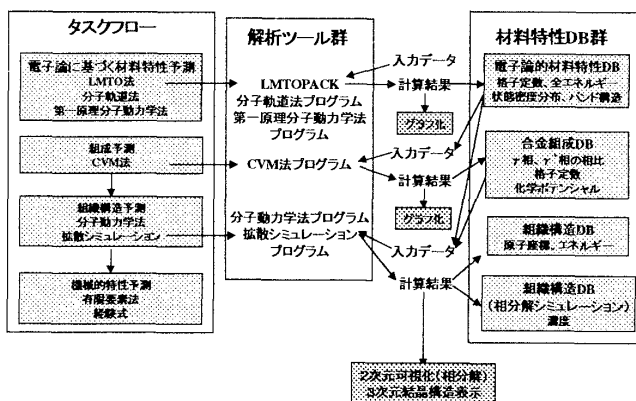


図1 解析フローおよびタスクフロー

3. 耐熱超合金を対象にした材料特性計算

3.1 材料特性計算の概要

ミクロスケールからマクロスケールの種々の材料特性を計算することにより、材料特性を多面的に評価することが可能である。仮想実験システムの検証として、耐熱超合金を対象にした組成予測、組織構造予測、電子論的材料特性予測等の計算を行っている。図1に、仮想実験システムを用いた解析フロー及びタスクフローを示す。タスクフローの最後にあるのが、マクロな機械的特性を予測するタスクであり、手法として有限要素法や経験式等が考えられる。現在、機械的特性予測のための解析ツールは組み込まれていないが、今後仮想実験システムに組み込む予定である。

電子論的材料特性予測は、小口が開発したLMTOPACK[4]を用いている。LMTOPACK法は、電子が感じる有効ポテンシャルを局所密度場近似で求め、時間に依存しない1電子シュレディンガー方程式を解くことで、状態密度、バンド構造、フェルミエネルギー、格子定数などを求める方法である。組成予測計算は、富士総合研究所が開発したCVM法プログラムを用いている。CVM法（クラスター変分法）は、自由エネルギーを最小にする四面体クラスター配置を求めるというもので、結晶構造が同じで原子配列のみ異なる2相間の平衡解析に有用な手法である[4]。ここで、計算に用いる原子間相互作用ポテンシャル、化学ポテンシャルは、システムに組み込まれている材料特性データベースを

参照することが可能である。組織構造予測として、分子動力学法プログラムを用いたシミュレーション、拡散方程式を用いた相分解シミュレーションを行っている。相分解シミュレーションは、熱力学的なデータを基に溶質の拡散を計算する手法であり、富士総合研究所が開発したプログラムを用いている。

3. 2 2元系合金 (Ni₃Al) を対象とした検証

2元系合金 Ni₃Al を対象とした材料特性計算を行った。以下に、計算結果の一部を示す。

図2は、LMTO法によって求めた Ni₃Al 全エネルギーと状態密度分布である。図2より、格子定数が 3.4849[10⁻¹⁰m]の時、系が最も安定であることが分かる。この結果は、実験値 (3.57[10⁻¹⁰m]) と良く一致している。図3は CVM法により Ni₃Al 合金の成分組成を計算した結果の状態図であり、実験値に良く一致している。図4は、CVM法で求めた格子ミスフィットを用いて Ni₃Al 合金の時効相分解をシミュレートした結果 (Ni₃Al 平均濃度=0.4) である。Ni₃Al 濃度の高い相が γ'相を表わしている。実際の組織と同様、硬い γ'相を柔らかい γ相がマトリックス状に包んでいるのがわかる。

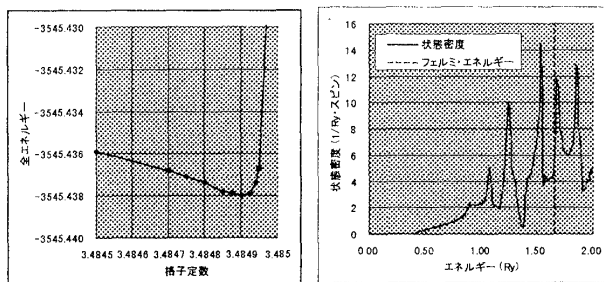


図2 Ni₃Al の全エネルギーおよび状態密度

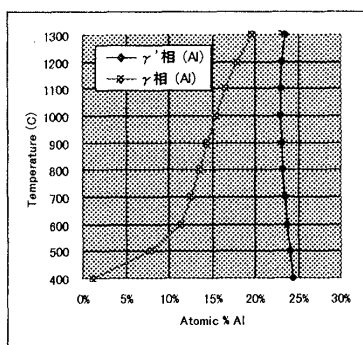


図3 Ni₃Al の状態図

3. 3 多元系合金 (CMSX2) を対象とした検証

実用的な超耐熱合金設計を考慮し、多元系合金を対象とした材料特性計算を行っている。図5は、CMSX2の組成を CVM法プログラムによって計算した結果である。この結果は、実際の組成を良く再現している [5]。今後は全体の解析フローを基に、他の材料特性の計算を行う予定である。

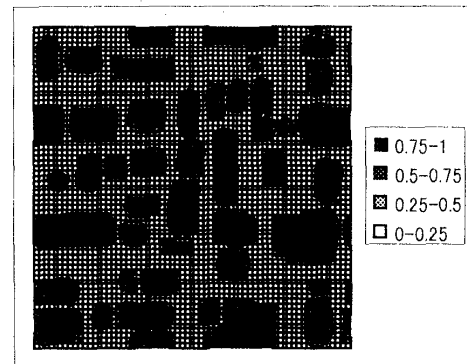


図4 Ni₃Al の相分解シミュレーション

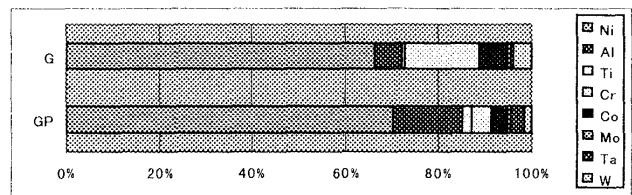


図5 多元系耐熱超合金 CMSX2 の組成

4. おわりに

仮想実験システムを用いて、Ni 基耐熱超合金を対象とした種々の材料特性計算を行い、一連の設計作業に対するタスクフローによる設計支援の有効性を確認した。また、コンテンツ (解析ツール群) の計算結果はよく実験を再現した。今後は、マイクロ・メゾスケールの計算から、マクロスケールにおける機械的特性予測を行う計算までを行い、さらに多元系合金を対象とした計算を行い、システムの有用性を検証していく予定である。

参考文献

- [1] N. Nishikawa, C. Nagano and H. Koike: Integration of Virtual Experiment Technology for Materials Design, Computerization and Networking of Materials Databases, ATSM STP 1311, 1997
- [2] 西川, 小池: 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発, 計算工学講演会論文集 Vol.3, 1998
- [3] 小池, 西川, 永田: 物質・材料設計のための仮想実験システム - システムの機能および実装方法 -, 情報処理学会 第58回 全国大会, 1999
- [4] 小口: "LMTOPACK チュートリアル", 1994
- [5] 榎本正人, 原田広史, 村上秀之: "クラスター変分法によるニッケル超合金の γ'/γ 平衡計算", 鉄と鋼, Vol.80, no.6, 1994
- [6] T Koyama, T Miyazaki: "Computer Simulation of Phase Decomposition in Two Dimensions based on a Discrete Type Non-linear Diffusion Equation", Materials Transactions, JIM, Vol.39, 1998