Phase–field方程式の各種パラメータと物性値の関連付け

1.　外力零のときの定常一次元 Phase–field 方程式の解

全自由エネルギー F を次のように定義する．

$$F = \int_{\mathcal{V}} \left[\left(\frac{1}{2} - p(\phi_\kappa) \right) E^{[\kappa]} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\chi}^{*[\kappa]} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla}\phi_\kappa \otimes \boldsymbol{\nabla}\phi_\kappa \right) + W^* q(\phi_\kappa) \right] \mathrm{d}v \tag{1}$$

ここで，$E^{[\kappa]}$ は

$$E^{[\kappa]} = \mathrm{sgn}\left(\tau^{[\kappa]}\right) S^{[\kappa]} \tau^{[\kappa]2} \tag{2}$$

である．また，強形式表示の Phase–field 方程式は次式のように書ける．

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = M_\phi \left[-E^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} - \boldsymbol{\chi}^{*[\kappa]} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla}\phi_\kappa \otimes \overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}} \right) + W^* \frac{\partial q(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \right] \tag{3}$$

ここで，$p(\phi_\kappa)$ および $q(\phi_\kappa)$ は次式で表される．

$$p(\phi_\kappa) = \phi_\kappa^3 (10 - 15\phi_\kappa + 6\phi_\kappa^2) \tag{4}$$

$$q(\phi_\kappa) = \phi_\kappa^2 (1 - \phi_\kappa)^2 \tag{5}$$

いま，外力が零 ($E^{[\kappa]} = 0$) の条件下で，$\boldsymbol{m}^{[\kappa]}$ 方向の定常一次元問題を考えると，式 (3) は次式のように簡単化できる．

$$\chi_\mathrm{m}^* \frac{\mathrm{d}^2 \phi_\kappa}{\mathrm{d}x^2} = W^* \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\phi_\kappa} \tag{6}$$

式 (6) の両辺に $\mathrm{d}\phi_\kappa/\mathrm{d}x$ を掛けて積分すると，左辺および右辺はそれぞれ

$$\int \frac{\mathrm{d}^2\phi_\kappa}{\mathrm{d}x^2} \frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x} \right)^2 + Constant, \qquad \int \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\phi_\kappa} \frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x = \int \mathrm{d}q = q + Constant \tag{7}$$

となる．$q(0) = 0$ を考慮し，$(\mathrm{d}\phi_\kappa/\mathrm{d}x)|_{\phi_\kappa=0} = 0$ として積分定数の値を定めた後，式 (7) を式 (6) に代入すると

$$\left(\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x} \right)^2 = \frac{2W^* q}{\chi_\mathrm{m}^*} \quad \text{or} \quad \frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x} = -\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}} \phi_\kappa (1 - \phi_\kappa) \tag{8}$$

となる．ただし，$\mathrm{d}\phi_\kappa/\mathrm{d}x < 0$ の場合のみ考慮している．さらに，式 (8) を変数分離すると

$$\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\phi_\kappa(1 - \phi_\kappa)} = -\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}} \mathrm{d}x \tag{9}$$

となる．式 (9) 左辺を不定積分すると

$$\begin{aligned} \int \frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\phi_\kappa(1 - \phi_\kappa)} &= \int \left(\frac{1}{\phi_\kappa} + \frac{1}{1 - \phi_\kappa} \right) \mathrm{d}\phi_\kappa \\ &= \ln \phi_\kappa - \ln(1 - \phi_\kappa) + C \\ &= \ln \frac{\phi_\kappa}{1 - \phi_\kappa} + C \end{aligned} \tag{10}$$

となるので，式 (9) の微分方程式を解くと

$$\ln \frac{\phi_\kappa}{1 - \phi_\kappa} = -\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}} x + C \quad \text{or} \quad \phi_\kappa = \frac{1}{1 + \exp\left(\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}} x \right)} + C \tag{11}$$

となる．ここで，任意の A および B に対して

$$1 - \tanh A = 1 - \frac{e^A - e^{-A}}{e^A + e^{-A}} = \frac{2}{e^{2A} + 1} \quad \text{or} \quad \frac{1}{1 + e^B} = \frac{1}{2}\left(1 - \tanh\frac{B}{2}\right) \tag{12}$$

が成り立つので，式 (12) を考慮し，$\lim_{x\to\infty}\phi_\kappa = 0$ とすれば，

$$\phi_\kappa = \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{\sqrt{2W^*}}{2\sqrt{\chi_\mathrm{m}^*}}x\right)\right] \quad \text{or} \quad x = -\sqrt{\frac{2\chi_\mathrm{m}^*}{W^*}}\mathrm{arctanh}(1 - 2\phi_\kappa) \tag{13}$$

となる．

2.　界面幅の定義

いま，界面を $\phi_\kappa = \mathit{\Delta}_{\phi_\kappa}$ から $1 - \mathit{\Delta}_{\phi_\kappa}$ までの間の領域と定義し，その x 方向の幅を δ とする．すると，式 (13) より

$$\begin{aligned}\delta &= x|_{\phi_\kappa = \mathit{\Delta}_{\phi_\kappa}} - x|_{\phi_\kappa = 1 - \mathit{\Delta}_{\phi_\kappa}} \\ &= -\sqrt{\frac{2\chi_\mathrm{m}^*}{W^*}}\left[\mathrm{arctanh}(1 - 2\mathit{\Delta}_{\phi_\kappa}) - \mathrm{arctanh}(2\mathit{\Delta}_{\phi_\kappa} - 1)\right] \\ &= \sqrt{\frac{2\chi_\mathrm{m}^*}{W^*}}\beta \qquad \left(\beta \equiv 2\mathrm{arctanh}(1 - 2\mathit{\Delta}_{\phi_\kappa})\right)\end{aligned} \tag{14}$$

と書ける．

3.　界面エネルギー

外力零の条件下で定常一次元を仮定すると，全自由エネルギーは

$$F = \int_C \left[\frac{1}{2}\chi_\mathrm{m}^*\left(\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x}\right)^2 + W^* q(\phi_\kappa)\right]\mathrm{d}x \tag{15}$$

と書ける．式 (15) において界面の法線方向全域に積分領域を取れば，F は界面エネルギー σ_m とみなせる．したがって，式 (8) および式 (9) を考慮して $x \to \phi_\kappa$ の変数変換を行って式 (15) を計算すると

$$\begin{aligned}\sigma_\mathrm{m} &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{2}\chi_\mathrm{m}^*\left(\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x}\right)^2 + W^* q\right]\mathrm{d}x \\ &= \int_1^0 \left(\frac{1}{2}\chi_\mathrm{m}^*\frac{2W^* q}{\chi_\mathrm{m}^*} + W^* q\right)\cdot -\sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\phi_\kappa(1 - \phi_\kappa)} \\ &= \sqrt{2W^*\chi_\mathrm{m}^*}\int_0^1 \phi_\kappa(1 - \phi_\kappa)\mathrm{d}\phi_\kappa \\ &= \frac{\sqrt{2W^*\chi_\mathrm{m}^*}}{6}\end{aligned} \tag{16}$$

となる．

4.　Phase–field モビリティ

界面が駆動力 $E^{[\kappa]}$ に比例した速度で移動するとすれば，その速さ V は

$$V = ME^{[\kappa]} \tag{17}$$

と書ける．いま，平衡プロファイルを保ちながら界面が移動すると仮定すれば，その時の Phase–field 方程式は

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = -M_\phi E^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \tag{18}$$

と書ける．ここで，式 (18) 左辺は

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = \frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} = V\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x} \tag{19}$$

と書けるため，式 (18) を書き改めると

$$V\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x} = -M_\phi E^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \tag{20}$$

と書ける．式 (20) の両辺に $\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$ を掛けて x で積分すると，左辺は

$$\begin{aligned} V\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x}\right)^2 \mathrm{d}x &= V\int_1^0 \left(\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x}\right)\mathrm{d}\phi_\kappa \\ &= -V\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}}\int_1^0 \phi_\kappa\left(1-\phi_\kappa\right)\mathrm{d}\phi_\kappa \\ &= \frac{V}{6}\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}} \end{aligned} \tag{21}$$

となり，右辺は

$$\begin{aligned} -M_\phi E^{[\kappa]}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa}\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x &= -M_\phi E^{[\kappa]}\int_1^0 \mathrm{d}p \\ &= M_\phi E^{[\kappa]} \end{aligned} \tag{22}$$

となるため，結局，V は次式のように表わすことができる．

$$V = 6\sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}M_\phi E^{[\kappa]} \tag{23}$$

式 (17) と式 (23) を比較すれば，M と M_ϕ の関係が次式のように書ける．

$$M = 6\sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}M_\phi \tag{24}$$

5. Phase–field パラメータと物性値の関係まとめ

$$\sigma_\mathrm{m} = \frac{\sqrt{2W^*\chi_\mathrm{m}^*}}{6}, \quad \delta = \sqrt{\frac{2\chi_\mathrm{m}^*}{W^*}}\beta, \quad M = 6\sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}M_\phi \tag{25}$$

$$\chi_\mathrm{m}^* = \frac{3\sigma_\mathrm{m}\delta}{\beta}, \quad W^* = \frac{6\sigma_\mathrm{m}\beta}{\delta}, \quad M_\phi = \frac{\beta}{3\delta}M \tag{26}$$

$$\beta \equiv 2\mathrm{arctanh}(1-2\varDelta_{\phi_\kappa}) \tag{27}$$

6. $q(\phi_\kappa) = \phi_\kappa^4(1-\phi_\kappa)^4$ の場合

$$\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\phi_\kappa^2(1-\phi_\kappa)^2} = -\sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}}\mathrm{d}x \tag{28}$$

$$\frac{1}{\psi^2(1-\psi)^2} = \frac{1}{\psi^2} + \frac{1}{(1-\psi)^2} + \frac{2}{\psi} + \frac{2}{1-\psi} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}\int \frac{\mathrm{d}\psi}{\psi^2(1-\psi)^2} &= -\frac{1}{\psi} + \frac{1}{1-\psi} + 2\ln\psi - 2\ln(1-\psi) + C \\ &= -\left[\frac{1}{\psi} - \frac{1}{1-\psi} - 2\ln\left(\frac{\psi}{1-\psi}\right)\right] + C \\ &\equiv -F(\psi) + C \end{aligned} \tag{30}$$

$$F(\psi) = \frac{1}{\psi} - \frac{1}{1-\psi} - 2\ln\left(\frac{\psi}{1-\psi}\right) \tag{31}$$

$$F(\phi_\kappa) + C = \sqrt{\frac{2W^*}{\chi_\mathrm{m}^*}}x \tag{32}$$

$x = 0$ で $\phi_\kappa = 1/2$ とすれば $C = 0$

$$x = \sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}F(\phi_\kappa) \tag{33}$$

6.1 界面幅の定義

$$\begin{aligned}\delta &= x|_{\phi_\kappa=\Delta_{\phi_\kappa}} - x|_{\phi_\kappa=1-\Delta_{\phi_\kappa}} \\ &= \sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}\left[F(\Delta_{\phi_\kappa}) - F(1-\Delta_{\phi_\kappa})\right] \\ &= \sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}\cdot 2\left[\frac{1}{\Delta_{\phi_\kappa}} - \frac{1}{1-\Delta_{\phi_\kappa}} + 2\ln\left(\frac{1-\Delta_{\phi_\kappa}}{\Delta_{\phi_\kappa}}\right)\right]\end{aligned} \tag{34}$$

$$\beta(\Delta_{\phi_\kappa}) = 2\left[\frac{1}{\Delta_{\phi_\kappa}} - \frac{1}{1-\Delta_{\phi_\kappa}} + 2\ln\left(\frac{1-\Delta_{\phi_\kappa}}{\Delta_{\phi_\kappa}}\right)\right] \tag{35}$$

$$\delta = \sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}\beta \tag{36}$$

6.2 界面エネルギー

$$\begin{aligned}\sigma_\mathrm{m} &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{2}\chi_\mathrm{m}^*\left(\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\mathrm{d}x}\right)^2 + W^*q\right]\mathrm{d}x \\ &= \int_1^0 2W^*q\cdot -\sqrt{\frac{\chi_\mathrm{m}^*}{2W^*}}\frac{\mathrm{d}\phi_\kappa}{\phi_\kappa^2(1-\phi_\kappa^2)} \\ &= \sqrt{2W^*\chi_\mathrm{m}^*}\int_0^1 \phi_\kappa^2(1-\phi_\kappa^2)\mathrm{d}\phi_\kappa \\ &= \frac{\sqrt{2W^*\chi_\mathrm{m}^*}}{10}\end{aligned} \tag{37}$$

6.3 モビリティ

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = -M_\phi E^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \tag{38}$$

式 (8)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} &= \frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} \\ &= -V\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial x} \\ &= V\sqrt{\frac{2W^* q(\phi_\kappa)}{\chi^*_{\mathrm{m}}}} \end{aligned} \tag{39}$$

$$V = -\sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^* q(\phi_\kappa)}} M_\phi E^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \tag{40}$$

$$V = -ME^{[\kappa]} \tag{41}$$

$$M = \sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^* q(\phi_\kappa)}} M_\phi \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \tag{42}$$

いま，定数 k を用いて関数 p と q の関係が

$$\frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} = k\sqrt{q(\phi_\kappa)} \tag{43}$$

と書けるならば,

$$M = k\sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^*}} M_\phi \tag{44}$$

関数 p および q をそれぞれ $p(\phi_\kappa) = a^*\phi_\kappa^3(10 - 15\phi_\kappa + 6\phi_\kappa^2)$ および $q(\phi_\kappa) = \phi_\kappa^4(1-\phi_\kappa)^4$ とすれば $k = 30a^*$ となり，Phase–field モビリティ M_ϕ とモビリティ M の関係が次のように書ける.

$$M = 30a^*\sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^*}} M_\phi \tag{45}$$

また，式 (34) および式 (37) を考慮すれば,

$$M = \frac{15\sqrt{10}a^*\delta}{\beta} M_\phi \quad \text{or} \quad M_\phi = \frac{\sqrt{10}\beta}{150a^*\delta} M \tag{46}$$

と書き換えられる.

6.4 Phase–field パラメータと物性値の関係まとめ

$$\delta = \sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^*}}\beta, \qquad \sigma_{\mathrm{m}} = \frac{\sqrt{2W^*\chi^*_{\mathrm{m}}}}{10} \tag{47}$$

$$\chi^*_{\mathrm{m}} = \frac{10\sigma_{\mathrm{m}}\delta}{\beta}, \qquad W^* = \frac{5\sigma_{\mathrm{m}}\beta}{\delta} \tag{48}$$

$$\beta(\Delta_{\phi_\kappa}) = 2\left[\frac{1}{\Delta_{\phi_\kappa}} - \frac{1}{1-\Delta_{\phi_\kappa}} + 2\ln\left(\frac{1-\Delta_{\phi_\kappa}}{\Delta_{\phi_\kappa}}\right)\right] \tag{49}$$

$$M = 30a^*\sqrt{\frac{\chi^*_{\mathrm{m}}}{2W^*}} M_\phi \quad \text{or} \quad M_\phi = \frac{\sqrt{10}\beta}{150a^*\delta} M \tag{50}$$