


時間分解X線イメージングによる非構造化データを用いた凝固ダイナミクスの定量的解析

	研究代表者	京都大学・工学研究所・教授 安田 秀幸（やすだ ひでゆき） 研究者番号:60239762
	研究課題情報	課題番号：22H04963 研究期間：2022年度～2026年度 キーワード：凝固・結晶成長、X線イメージング、時間分解・その場観察、三次元観察

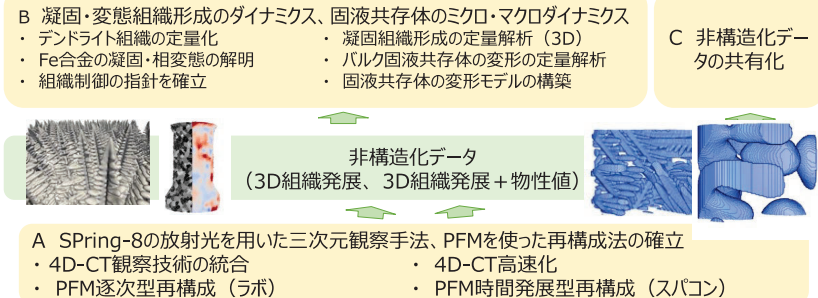
なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

大型放射光施設SPring-8では金属材料も透過する硬X線領域の単色光が利用でき、この特長を活かして二次元・三次元の凝固組織形成の時間分解観察が可能になりつつある。本課題では、凝固している組織を三次元で観察する時間分解トモグラフィー（4D-CT）と結晶構造やその方位を時間分解で測定できるX線回折測定（XRD）を統合した観察手法、熱力学に基づいたフェーズフィールドモデル（PFM）を用いた画像処理・再構成手法を実現し、非構造化データと呼ぶ凝固組織形成をそのまま記録したデータの獲得を目指している。この非構造化データの定量解析から凝固組織・欠陥形成の解明、鉄鋼材料などの凝固・相変態の実証的理解とその制御指針の確立、凝固過程で欠陥を生じさせる固液共存体の変形ダイナミクスの実証的理解と物理モデルへの展開を行う。また、非構造化データの共有化を実現し、凝固ダイナミクスの学理構築を目指す。



本研究



背景 放射光、三次元時間分解・その場観察（4D-CT + XRD）、フェーズフィールド計算

図1 研究全体のイメージ図と研究項目

●凝固現象とX線イメージング

金属材料の多くは、熔融状態から凝固・結晶成長プロセスを経由して製造される。材料特性を決定する組織・欠陥が形成する過程でもあり、物理現象の把握は重要である。一方、アルミ合金では600℃付近、ニッケル超合金や鉄鋼材料では1400℃以上で凝固するため、「凝固している」過程の観察は技術的に困難であった。凝固現象の実証的解明が研究分野の発展と工業プロセスへの貢献に不可欠と確信して研究を進めてきた。本研究グループは、SPring-8の数10keV以上の単色X線を利用して、世界ではじめて鉄鋼材料の凝固現象の観察に成功した。さらに、当初は困難と考えられていた時間分解の三次元観察（時間+3D=4D-CT）も可能であることを実証した。本研究では、金属材料の凝固現象の定量的な解析を実現する時間分解X線イメージング（4D-CT、XRD、PFMを統合した手法）を目指している。

●凝固現象とX線イメージング

本課題では、事前に測定変数を定義する必要がない、ありのままのデータを非構造化データと定義している。従来研究の凝固組織観察は、事前に決めた観察内容に特化した凝固後の静的な組織観察であり、構造化データに分類される。先に述べた4D-CT、XRD、PFMによる時間発展観察は組織形成をそのまま記録して

おり、実空間・逆空間の組織形成に関する非構造化データと言える。このようなデータは、溶断など凝固現象の素過程、組織と結晶方位の関係、体積・格子定数の温度変化（体積膨張率）、相変態に伴う体積変化、 dendrite組織における固液界面積・界面曲率といった特徴量を評価でき、凝固組織制御や予測において多様な応用がある。さらに、第三者にも利用価値がある非構造化データを共有化により波及効果も期待できる。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●三次元観察・再構成法の確立

図2の時間分解三次元観察装置を開発し、熱力学原理が含まれているPFMを利用した三次元組織の再構成手法と組み合わせることにより、Al、Mg、Ti、Ni、Fe合金の凝固過程を定量的に解析できるデータを獲得する。PFMを利用した解析では、二つの手法の開発を目指している。一つは、逐次的に熱力学的駆動力を用いて三次元像の最適化を行い、固液界面形状の高精度な再現を目指す。もう一つは、データ同化の手法を取り入れ、観察された組織を再現するPFMの時間発展計算を行う。いわば、時間発展型再構成であり、観察結果を再現する物性値も同時に決定することができる。

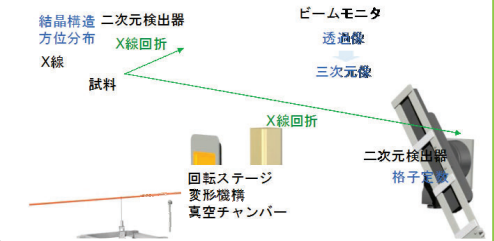


図2 4D-CT・XRD観察系の模式図

●凝固・変態組織形成のダイナミクス

金属材料が dendrite成長することは知られているが、組織や欠陥形成に関わる固液界面積や曲率などの定量データはほとんどない。また、Fe合金の凝固・相変態でも定説と違う変態が透過像観察により明らかになっている。本研究では、(1)立方晶系・六方晶系金属材料（Al、Mg合金など）の dendrite成長の定量データを得て、欠陥形成などの解析に応用する、(2) Fe合金で見出された凝固過程および凝固後の相変態における組織形成の機構を解明して、凝固組織の制御指針を確立する。

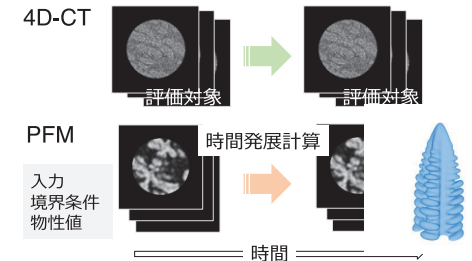


図3 FPMを使った再構成手法

●固液共存体のマイクロ・マクロダイナミクス

固液共存領域では固体や液体とは違う力学的な特性が発現し、この固有の力学特性が材料の欠陥形成に寄与していることが局所的な観察により明らかになっている。本課題では、4D-CTとXRDの特長を活かして数万个から10万个の粒子から構成される固液共存体の変形過程の観察を実現する。このバルク試料の変形を解析して不均一変形であるせん断帯の形成機構を解明する。さらに、種々のシミュレーションに応用可能な固液共存体の変形モデルを構築する。

●非構造化3Dデータの共有化

非構造化データと言える4D-CT・XRDのデータは、 dendrite組織の力学計算、固液共存領域の流体力学計算など多様なモデリングに利用できる。データの共有化による研究分野の発展を目指す。

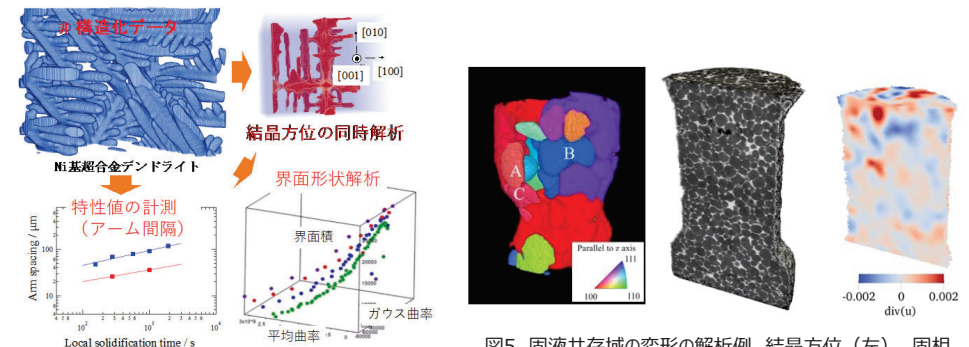


図4 非構造化データの解析例

図5 固液共存域の変形の解析例 結晶方位（左）、固相粒の分布（中）、ひずみ速度（右）