

局所曲率マルチバーテックスモデルによる結晶粒成長に関する研究－結晶粒成長シミュレーション技術の開発－

メタデータ	言語: ja 出版者: 公開日: 2017-10-05 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: メールアドレス: 所属: 金沢大学
URL	http://hdl.handle.net/2297/42310

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



学 位 論 文 要 旨

学位請求論文名

Study on grain growth by local curvature multi-vertex model

— Development of grain growth simulation technology —

(邦題)

局所曲率マルチバーテックスモデルによる結晶粒成長に関する研究

— 結晶粒成長シミュレーション技術の開発 —

所属 機械科学 専攻 次世代鉄鋼総合科学 講座

氏名 玉木 輝幸

主任指導教員氏名 潮田 浩作

学位論文要旨

要約

Steel is used in many fields, such as vehicles, railroad, energy, architecture and machinery. In recent years, higher performance has been increasingly required from the viewpoints of environmental conservation and security commitment issues. Steel is a polycrystalline material in which the grain size, grain size distribution and texture have a significant effect on its properties. Therefore, it is very important to predict and control these factors in order to produce high quality material.

This study focuses on the change in the microstructure and texture caused by normal and abnormal grain growth in metallic materials. In addition, it aims to elucidate the mechanism on grain growth and texture formation in steel material through the following approaches.

First, a local curvature multi-vertex grain growth model, which is a physical and direct model for grain growth, was proposed. A simulator was then manufactured based on the proposed model, and the validity of the proposed model was evaluated. Next, in order to investigate the mechanisms on the evolution of grain growth and texture formation, the change in grain size, grain boundary characteristics and texture during grain growth in real steel sheets was evaluated using the simulator. Finally, a pinning model for grain boundary migration with one pinning particle was proposed. In the presence of pinning particles, models of normal grain growth and abnormal grain growth by controlling the grain boundary energy were established.

The results of the present study are expected to contribute to the progress in the steel technology by being applied not only to scientific elucidation of microstructure control of metallic materials, particularly steel material, but also to the exploration of ideal materials and process.

本文

鉄鋼材料は、自動車、鉄道、エネルギー、建築、機械などの多くの分野で使われており、環境保全や安全確保の観点から、益々高い性能を要求されている。鉄鋼材料は多結晶材料であり、多結晶材料の結晶粒径と集合組織は材料特性に大きく影響を及ぼす。このため、結晶粒径と集合組織を予測して制御することは、高品質な材料を造り込むために極めて重要である。

本研究では、金属材料の正常粒成長および異常粒成長に伴う組織変化と集合組織変化に着目して、鉄鋼材料における結晶粒成長の発現機構と集合組織の形成機構を解明し、それによって集合組織の観点から鉄鋼材料の高品質化を図ることを目的として、局所曲率マルチバーテックスモデルを提案した。提案した二次元局所曲率マルチバーテックスモデルを実鋼板の正常粒成長に適用し、さらに1つのピン止め粒子に着目したピン止めモデルを提案して、ピン止め粒子存在下の正常粒成長のモデル化、および粒界エネルギー制御による異常粒成長のモデル化を行った。

第2章においては、改善されたバーテックスモデルの問題を解決でき、物理原理を直接的に表現した、新しい二次元のトポロジカルネットワークモデル、すなわち局所曲率マルチバーテックスモデルを提案することを目的とした。特に、本モデルのコンセプト、シミュレーションにあたっての空間や時間間隔や三重点の取り扱いに関する工夫と条件の適正化、およびモデルの検証に焦点を絞った。

提案した二次元の局所曲率マルチバーテックスモデルは、結晶粒界の曲率と三重点での粒界張力を考慮した物理原理に基づいた、直接的に粒成長を表現した二次元トポロジカルネットワークモデルである。提案モデルでは、粒界上に仮想点(二重点)を配置して粒界の局所曲率から粒界移動の駆動力は導かれ、三重点に繋がる粒界の張力から三重点移動の駆動力は導かれ、これらの駆動力から粒界および三重点の移動を算出することができる。この手法により、従来の結晶粒成長を記述する曲率モデルやバーテックスモデルと比べて精度良く結晶粒成長を予測することができる。また、結晶粒成長に伴って、仮想点の生成および消滅を行うことで、仮想点を適切に配置することができる。さらに、平均結晶粒径に応じて、仮想点間隔を適正化する

ことで、位置および速さの計算精度を確保できることを確認した。時間発展間隔については平均結晶粒径に応じて適正化することにより、計算速度を確保しつつ計算時間精度を確保できることを確認した。結晶粒成長に伴い結晶粒のトポロジー変換が必要となるが、三重点スイッチングおよび結晶粒消滅の臨界粒径長さ、隣接点間隔、時間発展間隔を適切に設定することで、計算を安定して実行できることを確認した。これらの検討結果を踏まえて、平均結晶粒径を基準として、位置の計算精度として約 1%を、速度の計算精度として約 2%を見込めるシミュレーションパラメータのセットを示した。提案モデルに基づいてシミュレータを製作して、このように適正化したパラメータを用いて人工的に作成した結晶粒の粒成長シミュレーションを実行した。結晶粒成長が安定して計算でき、結晶粒成長時間発展において平均結晶粒面積が時間にほぼ比例していることを確認した。仮想点の生成・消滅を含む提案モデルは結晶粒成長に適用可能であることを確認した。

第 3 章では、提案した二次元局所曲率マルチバーテックスモデルを、実鋼板の正常粒成長に適用することを目的とした。

まず、粒界エネルギーと粒界易動度のそれぞれについて、異なる結晶粒方位角度差依存性の条件でシミュレーションを行い、粒界エネルギーと粒界易動度のそれぞれについて結晶粒成長への影響を議論した。粒界エネルギーは結晶粒成長による結晶粒方位角度差分布の変化に大きな影響を与え、粒界易動度はあまり大きな影響を与えないことがわかった。

さらに、シミュレーションによる結晶粒成長結果を、実験による実鋼板の結晶粒成長結果と比較した。つまり、ここでは実際の三次元の現象に対して二次元のシミュレーションを適用した。三次元の実験結果の正確なトポロジーを取得することは常に容易であるわけではないので、実際の三次元現象の二次元データを EBSD 分析によって取得し、シミュレーションに用いた。粒界エネルギーおよび粒界易動度の結晶粒方位角度差依存性、特に $\Sigma 1$ 粒界および高角粒界を考慮したシミュレーションが、実験結果を再現するのに有効であることがわかった。

またさらに、実験結果とシミュレーション結果をより詳細に比較した。具体的には結晶粒成長における隣接する結晶粒の方位角度差分布、結晶粒径分布、および集合組織の変化を調査し

て考察した。結晶粒成長シミュレーションで得られたマイクロ組織は、実験のマイクロ組織と似ていた。しかしながら、シミュレーションの結晶粒径分布の標準偏差は実験の標準偏差より小さかった。シミュレーションでの結晶粒成長による集合組織の変化は、実験での集合組織の変化より小さかった。全体としては、開発モデルは実験の正常粒成長をよく記述できたと言える。シミュレーションと実験の違いは、シミュレーションは二次元で、実験は三次元である次元の違いと、モデルで使用する粒界エネルギーおよび粒界易動度のような粒界性格の不正確さであると推測される。

第4章では、既提案の二次元局所曲率マルチバーテックスモデルに適用可能なメゾスケールのピン止めモデルを提案した。このモデルは、粒界エネルギー最小を評価関数とする物理モデルであり、粒界エネルギーを算出するために、有効範囲(有効長さ)を設定した。有効長さの設定により、粒界の最小長さに依らないピン止めモデルとすることができた。ピン止めが外れた平衡状態の粒界エネルギーがピン止めされた粒界のエネルギーより小さくなることを、ピン止めが外れる第一条件とした。さらに、ピン止めが外れるときに一旦増大する粒界エネルギーが、新たに導入した乗り越え可能なエネルギーより小さくなることを第二条件とした。

本提案モデルは第一条件のみを設定することにより、ピン止め粒子の微細分散効果を再現できた。また、本提案モデルは、修正された Zener のピン止めモデルを、最大ピン止め力と粒界のピン止め幅を同時に考慮し新たに修正したモデルと一致することを確認した。さらに、第二条件も考慮することにより、低エネルギー粒界で囲まれた結晶粒の異常成長を表現できた。

これらの研究開発成果は、鉄鋼材料さらには金属材料の集合組織制御の科学的解明や、理想材料・プロセスの探求に応用展開され鉄鋼技術の発展に寄与できるものと確信している。

学位論文審査報告書（甲）

1. 学位論文題目（外国語の場合は和訳を付けること。）

局所曲率マルチバーテックスモデルによる結晶粒成長に関する研究 — 結晶粒成長シミュレーション技術の開発 —

2. 論文提出者 (1) 所 属 機械科学 専攻

(2) 氏 名 玉木 輝幸

3. 審査結果の要旨（600～650字）

当該学位論文に関し、平成27年1月30日に第1回学位論文審査委員会を開催し、提出された学位論文および関連資料について詳細に審査した。同日に口頭発表の後、第2回学位論文審査委員会を開催し、慎重に協議の結果、以下の通り合格と判定した。

本論文は、多結晶鉄鋼材料の特性が結晶粒径と集合組織に大きく影響されることを背景に、結晶粒成長とそれともなう集合組織の変化を予測する結晶粒成長シミュレーション技術の開発を目的に取り組みされたものである。すなわち、結晶粒成長を記述する物理モデルとして、結晶粒界の曲率、および三重点での結晶粒界エネルギーと粒界張力を考慮した局所曲率マルチバーテックスモデルを提案した。その物理モデルに基づき、シミュレータを作製し、モデルの妥当性と適用の可能性を検討した。提案した二次元局所曲率マルチバーテックスモデルを実鋼板の結晶粒成長に適用し、粒成長にともなう結晶粒の粒径分布の変化とその時間則、隣接粒間の粒界性格や集合組織の変化からモデルを評価し妥当性を確認した。また、将来課題を抽出した。さらに、1つのピン止め粒子に着目した結晶粒成長ピン止めモデルを提案して、ピン止め粒子分散下での正常粒成長のモデル化、および結晶粒界エネルギー制御による異常粒成長のモデル化にも成功した。

以上のように、本論文は結晶粒成長について新たなモデルを提案するものであり、広い応用も期待できる。学術的にも工業的にも価値が高く、博士（工学）の学位に値すると判定した。

4. 審査結果 (1) 判 定（いずれかに○印） 合格 ・ 不合格

(2) 授与学位 博士（工学）