

Title	高次マルチフェーズフィールドモデリングによる結晶材料の粒成長過程の研究
Author(s)	廣内, 智之
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/59215">https://hdl.handle.net/11094/59215</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

## 論文内容の要旨

本論文では、分子動力学法 (MD) に基づく粒界エネルギーや従来の知見に基づく粒界モビリティなどの詳細な粒界特性をMulti-phase-field(MPF)モデルに導入し、安定な粒成長解析の行える高次MPFモデリングを提案した。構築した新たな計算材料科学による手法を用いて、純アルミニウム (Al) と純銅 (Cu) の粒界特性を考慮した多結晶粒成長解析を行うとともに、電子後方散乱回折 (EBSD) 法を用いて純Alと無酸素銅の実組織を評価し、それらの特徴と解析結果を比較した。そして、より現実的な材料内部組織の予測手法を構築するための指針を考察した。

第1章では、研究背景として金属多結晶材料の組織制御に利用される再結晶・粒成長およびそれらを予測する数値解析手法について述べ、粒成長過程も最終組織を決定する上で重要であることを論じた。粒成長では粒界領域の減少が駆動源となるため、詳細な粒界特性を考慮した数値解析手法の構築が不可欠であることを述べた。

第2章では、MDに基づく大きな異方性を持つ粒界特性を適用しても安定に解析できる高次MPFモデルを提案した。さらに、対応粒界の面方位依存性の効果を考慮できるモデルへと拡張した。

第3章では、高次MPFモデルの構築に至る背景とその過程について詳細に述べた。従来モデルによる多結晶粒成長解析では、粒界特性の大きな異方性により三重点などで解析が不安定化した。解析を安定化させる高次項の重み関数を提案し、従来モデルに高次項を加えて高次MPFモデルを構築した。本モデルの精度評価として一連の粒成長解析を行い、比較した理論との良好な一致を確認した。

第4章では、高次MPFモデルによる粒成長解析について述べた。純Alの2種類の粒界特性の方位差依存性を考慮した多結晶粒成長解析では、三重点で連結する粒界エネルギー差が大きい場合に非現実的な組織が形成され、実組織での三重点ではエネルギー差が小さくなるように粒界が連結することを示唆した。面方位依存性の影響を考慮した純Alと純Cuの多結晶粒成長解析では、面方位依存性が組織の異方性を発現させ、対応粒界のエネルギーのより低い純Cuの方が異方性の強い組織を形成した。

第5章では、EBSD法を用いて純Alと無酸素銅の実組織を解析し、結晶面、粒径・粒形状、粒界方位差分布の点から評価した。そして、次元の効果、粒界方位差分布、不純物の効果、温度の効果、双晶粒界の分布の点から実組織と解析結果の違いを整理した。

第6章では、本研究の統括を述べた。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、分子動力学法 (MD) に基づく粒界エネルギーや従来の知見に基づく粒界モビリティなどの大きな異方性を導入した場合でも、安定な粒成長解析を行える高次マルチフェーズフィールド (MPF) モデルを構築した。この新たな計算材料科学の手法を用いて、純アルミニウム (Al) と純銅 (Cu) の粒界特性を考慮した多結晶粒成長解析を行うとともに、電子後方散乱回折 (EBSD) 法を用いて純Alと無酸素銅の実材料における微視組織を観察し解析した。粒成長解析と実材料組織を比較し、より現実的な内部組織予測手法を構築するための指針を考察した。その主な成果は以下のとおりである。

- (1) 従来のMPFモデルにおいて、三重点に連結する粒界のエネルギー差が大きいときに、三重点領域で解析が不安定化することを示している。これを解決する方法として、従来のモデルに高次項を加え、三重点周辺の粒界特性から高次項の寄与の大きさを決定できる高次MPFモデルを構築している。
- (2) (1)で構築した高次MPFモデルを用いて、単一粒成長解析、三重点挙動解析、四重点挙動解析を行い、本モデルが理論を良好に再現することを確認している。
- (3) 粒界面方位の効果を考慮できる高次MPFモデルへと拡張し、MDに基づく対応粒界の面方位依存性を本モデルに適用できる面方位依存性関数として提案している。本モデルを用いて単一粒の平衡形を評価し、Σ3粒界で囲まれる粒形状が理論を良好に再現することを示している。そして、粒界特性の面方位依存性が、三重点の粒成長挙動を決める重要な因子であることを明らかにしている。

[106]

氏名	ひろうち ともゆき 廣内智之
博士の専攻分野の名称	博士 (工学)
学位記番号	第 25497 号
学位授与年月日	平成 24 年 3 月 22 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科機械工学専攻
学位論文名	高次マルチフェーズフィールドモデリングによる結晶材料の粒成長過程の研究
論文審査委員	(主査) 教授 濫谷 陽二 (副査) 教授 久保 司郎 准教授 垂水 竜一 京都工芸繊維大学大学院工学科学研究科機械システム工学部門教授 高木 知弘

- (4) 純Alの粒界特性の方位差依存性を考慮した多結晶粒成長解析では、三重点で連結する粒界のエネルギー差が大きいつきに非現実的な組織を形成することを示している。そして、純Alの粒界特性の面方位依存性を導入することで、組織の異方性を発現できることを示している。
- (5) 純Cuの粒界特性の面方位依存性を導入することにより、純Alよりも異方性の強い組織発展を示している。解析結果と実材料組織の双晶粒界の分布を比較することで、双晶粒の成長には粒成長を駆動させる粒界エネルギー以外の駆動源が関与していることを示唆している。

以上のように、本論文は MD に基づく詳細な粒界特性を導入できる新たな計算材料科学の手法を提案し、粒成長解析の結果と実材料の組織観察の比較からより現実的な内部組織予測の実施に必要な指針を示すものであり、構造用材料の高精度な組織制御を援用する数値解析手法になると期待される。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。