

氏 名	たかしまのる 高 島 稔
学位(専攻分野)	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	論 工 博 第 3896 号
学位授与の日付	平 成 18 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	多結晶体の粒界方位の解析方法と多結晶鉄合金の粒界性質に関する研究

論文調査委員 (主 査) 教授 長 村 光 造 教授 牧 正 志 教授 落合庄治郎

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、一般的に多結晶体の粒界および5次元粒界方位空間の対称性を明らかにし、実際に応用した結果を取りまとめたもので、6章からなっている。

第1章は序論であり、第2章では、まず粒界および5次元粒界方位空間の対称性を明らかにし、多結晶体中の粒界は5次元粒界方位空間内にどのように分布しているか、解析、表示するための理論を構築した。次に粒界を構成する2つの面の表面構造に基づく新しい粒界幾何学的モデルを提案した。次いで、多結晶 Fe 合金中の約1000の粒界に関し、先に提案した5変数を用いた完全な粒界方位記述方法により粒界方位を解析し、粒界ぬれ現象の粒界方位依存性を明らかにすると共に、粒界幾何学的モデルとの比較を行った。最後に多結晶 Fe 合金の粒界頻度に及ぼす粒界方位の影響を明らかにした。5次元粒界方位空間に関しては、

- 1) 等価な粒界方位を考慮して、「粒界面表示法」における (n_1, n_2, ϕ) の範囲は n_1 については、標準ステレオ三角形 $([100]-[110]-[111])$ 直角球面三角形内、 n_2 については、標準ステレオ四角形 $([100]-[110]-[111]-[101])$ 直角球面四角形内、 ϕ については $0 \leq \phi < 2\pi$ に減縮されることを示した。
- 2) 全ての等価な粒界方位について、参照極点 p_i と q_j と、粒界面の結晶学的面方位 n_1, n_2 との成す角がある許容値 β より小さい粒界を餞別し、これを ϕ に対してプロットすることにより、粒界性質や粒界頻度を5次元粒界方位空間内で表示する方法を提案した。

第3章では粒界の幾何学的モデルを提案し、粒界 $(h_1k_1l_1)(h_2k_2l_2)$ ϕ において「特殊粒界」(低エネルギー粒界)となる粒界の幾何学的関係について $(h_1k_1l_1)$ 面と $(h_2k_2l_2)$ 面の表面構造に基づく以下のモデルを提案し、分子動力学法による粒界エネルギー計算結果とよく一致することを示した。

- 1) 粒界を構成する2つの面のステップ方向が平行となる「ステップ平行粒界」において「特殊粒界」となる。
- 2) $(h_1k_1l_1)$ 面、 $(h_2k_2l_2)$ 面にキンクおよびステップの割合 R_{sk} が小さい粒界において「特殊粒界」となる。

第4章では Fe-Mn-Cu 多結晶合金の粒界ぬれ挙動に及ぼす粒界方位の影響について調べ、次のことを明らかにしている。

- 1) Fe-Mn-Cu 多結晶合金に関し、5変数を用いた完全な粒界方位記述による粒界方位と粒界ぬれ挙動との関係を明らかにした。
- 2) 非対称粒界を含め、多くの DryGB は、「小角粒界」、「ステップ並行粒界」、 $(111)(111)$ ϕ 粒界のいずれかに分類された。このことは、先に提案した粒界の幾何学モデルとよく一致している。

第5章では Fe-Mn-Cu 多結晶合金の粒界頻度に及ぼす粒界方位の影響について調べている。

- 1) Fe-Mn-Cu 多結晶合金に関し、5変数を用いた完全な粒界方位記述による粒界方位と粒界頻度との関係を明らかにした。
- 2) Fe-Mn-Cu 多結晶合金においては、「双晶粒界」 $(111)(111)60^\circ$ および「小角粒界」の頻度が非常に高く、特に粒界面が (111) 面、 (110) 面、 (100) 面で構成されている「小角粒界」の頻度が高いことが明らかとなった。

3) (111) 面, (110) 面, (100) 面上では安定な転位網を構成することが可能であり, そのために (111) 面, (110) 面, (100) 面を有する「小角粒界」の頻度が高かったものと考察された。

第6章は結論であり, 本論文で得られた成果を要約している。

論文審査の結果の要旨

本論文は, 本論文は一般的に多結晶体の粒界および5次元粒界方位空間の対称性を明らかにし, 多結晶体中の粒界は5次元粒界方位空間内にどのように分布しているか, 解析, 表示するための理論を構築し, 実際に応用した結果を取りまとめたもので, 得られた主な成果は次の通りである。

等価な粒界方位を考慮して, 「粒界面表示法」における (n_1, n_2, ϕ) の範囲は n_1 については標準ステレオ三角形 $([100]-[110]-[111])$ 直角球面三角形内, n_2 については標準ステレオ四角形 $([100]-[110]-[111]-[101])$ 直角球面四角形内, ϕ については $0 \leq \phi < 2\pi$ に減縮されることを示した。全ての等価な粒界方位で参照極点 p_i と q_j と, 粒界面の結晶学的面方位 n_1, n_2 との成す角がある許容値 β より小さい粒界を選別し, これを ϕ に対してプロットすれば, 粒界性質や粒界頻度を5次元粒界方位空間内で表示できる方法を提案した。

粒界 $(h_1k_1l_1)(h_2k_2l_2)$ ϕ において「特殊粒界」(低エネルギー粒界)となる粒界の幾何学的関係について $(h_1k_1l_1)$ 面と $(h_2k_2l_2)$ 面の表面構造に基づく以下のモデルを提案し, 分子動力学法による粒界エネルギー計算結果とよく一致することを示した。すなわち(1)粒界を構成する2つの面のステップ方向が平行となる「ステップ平行粒界」において「特殊粒界」となる。(2) $(h_1k_1l_1)$ 面, $(h_2k_2l_2)$ 面にキングおよびステップの割合 R_{sk} が小さい粒界において「特殊粒界」となる。

Fe-Mn-Cu 多結晶合金に関し, 5変数を用いた完全な粒界方位記述による粒界方位と粒界ぬれ挙動との関係を明らかにした。非対称粒界を含め, 多くの DryGB は, 「小角粒界」, 「ステップ並行粒界」, $(111)(111)$ ϕ 粒界のいずれかに分類された。このことは先に提案した粒界の幾何学モデルとよく一致している。

Fe-Mn-Cu 多結晶合金に関し, 5変数を用いた完全な粒界方位記述による粒界方位と粒界頻度との関係を明らかにした。Fe-Mn-Cu 多結晶合金においては, 「小角粒界」の頻度が非常に高く, 特に粒界面が (111) 面, (110) 面, (100) 面で構成されている「小角粒界」の頻度が高いことが明らかとなった。(111) 面, (110) 面, (100) 面上では安定な転位網を構成することが可能であり, そのために (111) 面, (110) 面, (100) 面を有する「小角粒界」の頻度が高かったものを考察された。

以上要するに本論文は, 多結晶体の粒界および5次元粒界方位空間の対称性を明らかにし, 実際に応用した結果を取りまとめたもので, 学術上, 実際上寄与するところが少なくない。よって, 本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認める。また, 平成18年2月20日, 論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果, 合格と認めた。