

結晶粒界面決定に関する数学的考察について -数学で結晶の図形の性質を調べる-

新日鐵住金株式会社・先端技術研究所 中川淳一

結晶粒の成長の過程において、始めに多数の微小な結晶核が形成され、それぞれが別々に成長して多結晶になるが、形成された多結晶体を構成する結晶粒は、隣接する結晶粒と一般に方位が異なっており、この不連続な境界面を結晶粒界と呼ぶ。結晶粒界は、材料の強度等の諸特性を決定する重要な因子であり、図1に示すように多様な多面体図形から構成されている。

一方、計測技術の進歩により材料内部のメソスコピックな図形の3次元マイクロ組織の情報が入手できるようになってきており、結晶粒の方位も計測可能である。しかし、計測された結晶粒の方位は、3次元画像を構成するボクセル全体の集合のなかで、同じ程度の方角を有するボクセルの部分集合として認識されているに過ぎず、離散的に分布するボクセルの方角情報から多面体としての結晶粒界面を決定する方法は自明ではない。

今回のスタディグループで議論したい3つの数学的議題は以下のとおり。

- (1) 結晶粒とは、球体に同相な3次元空間に存在する多面体であり、その境界のすべての頂点で多角形が3つの辺で交わるものと定義できる。結晶粒の境界は2次元球面に同相なので、2次元球面の単体分割(3角形分割)から、結晶粒の多面体に関する豊富な情報を引き出すことが可能と思われる。
- (2) 結晶粒界の生成機構という観点から、隣接する結晶に拘束された結晶粒は、その体積を囲む閉曲面全体のなかで非等方的表面エネルギーを最小にするように決定されると考えられ、凸多角形形成の偏微分方程式的アプローチや変分学的アプローチが有効と思われる。
- (3) 結晶を構成する原子配列の観点からは、方位の異なる隣接した結晶粒の境界面は、互いの結晶粒の原子の格子配列のずれを最小にするように、いいかえると、粒界面のエネルギーが最小になるように決定される。結晶格子のずれを図形の回転操作および平行移動操作により最小にするような群論的アプローチが有効と思われる。

本課題提供者の10年以上に亘る多数の数学者との連携経験から、数学の強みは、諸科学・工学・産業で得られている一連の実験的事実を一貫性のある論理で統合できる思考体系を有していること、さらに、ものごとの本質をとことん考え追求する学術文化を有していることにあると考えている。その結果、諸事実間の因果関係が合理的に繋がれば、既存技術のブレークスルーに導く着想を得るのは比較的容易である。下記の3つの議題は、一見異なる問題設定に見えるが、問題の背後には、或る不変な数理構造が存在すると感じている。原理原則の追求の議論に、一緒にチャレンジしていただければ幸いである。

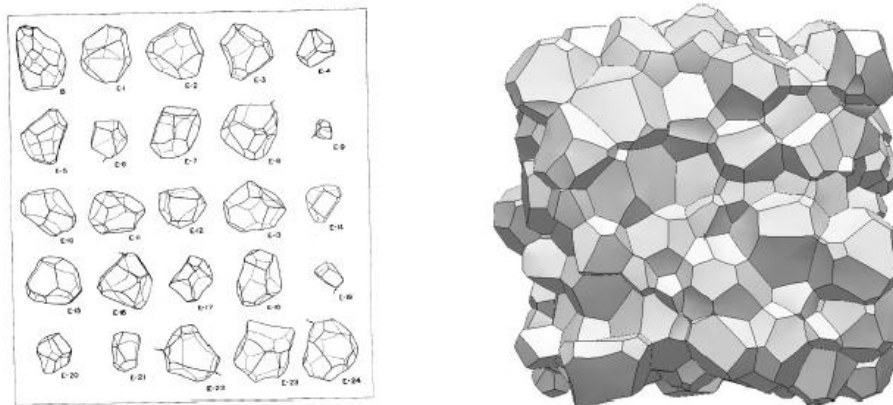


図1 多結晶の3次元図形の事例[Lazar, Mason, MacPherson, Srolovitz, 2011]