技術論文
Technical Paper

セルラーオートマトン法を用いたオーステナイト粒の異常粒成長シミュレーション

村田憲治*[1, 2], 福井ちひろ*[2], 孫　飛*[3], 陳　達徳*[3], 足立吉隆*[3]

Simulation of Abnormal Grain Growth Using the Cellular Automaton Method

Kenji MURATA, Chihiro FUKUI, Fei SUN, Ta-Te CHEN and Yoshitaka ADACHI

Synopsis

The abnormal grain growth of steel, which occurs during carburization, adversely affects properties such as heat treatment deformation and fatigue strength. This study aimed to control abnormal grain growth by controlling the materials and processes. Thus, it was necessary to investigate the effects of microstructure, precipitation, and heat treatment conditions on abnormal grain growth. We simulated abnormal grain growth using the cellular automaton (CA) method. The simulations focused on the grain boundary anisotropy and dispersion of precipitates. We considered the effect of grain boundary misorientation on boundary energy and mobility. The dispersion state of the precipitates and its pinning effect were considered, and grain growth simulations were performed. The results showed that the CA simulation reproduced abnormal grain growth by emphasizing grain boundary mobility and the influence of the dispersion state of the precipitate on the occurrence of abnormal grain growth. The study findings show that the CA method is a potential technique for the prediction of abnormal grain growth.

1．緒　言

自動車向けの動力伝達部品には歯車機構が用いられる．こうした歯車には高い表面硬さと高い靭性を両立させることが求められるため，JIS-SCr420 などの表面処理用の機械構造用鋼に対して浸炭処理を行われることが一般的である．近年，カーボンニュートラルの観点から，自動車の製造時の CO_2 排出量削減が求められている．CO_2 を排出する自動車用歯車の製造工程の一つに，熱間鍛造にて素形材を成型する工程がある．この工程を冷間鍛造とすることで，製造時の CO_2 排出量の削減が可能となる．しかし，冷間鍛造とすることで，冷間鍛造時の大きなひずみの影響により，浸炭工程にてオーステナイト粒が異常粒成長を起こし，熱処理ひずみや，疲労強度といった歯車に必要とされる特性に影響を与えてしまうことが知られている[1]．従って，異常粒成長を予測することは工業的に重要であるが，析出物の量，分散状態，初期オーステナイト粒度といったいくつかの材料学的な要因を実験的に定量化し，異常粒成長の過程を熱処理中に観察することは困難である．よって，異常粒成長を再現できるセルラーオートマトン（以下，CA という）法を研究することとした．

粒成長には，例えば，モンテカルロ法[2)～5)]や，CA 法[6)～9)]，フェーズフィールド法[10), 11)]といったいくつ

2024年 3月 28日 受付
＊1 大同特殊鋼㈱技術開発研究所（Corporate Research & Development Center, Daido Steel Co., Ltd.）
＊2 名古屋大学 大学院工学研究科（Graduate School of Engineering, Nagoya University）
＊3 名古屋大学 大学院工学研究科，工博（Dr. Eng., Graduate School of Engineering, Nagoya University）

かの方法が知られている．こうした方法は定常粒や異常粒成長をシミュレーションするために用いられてきた．例えば，早川らは，モンテカルロ法を用いて粒界方位差を導入した異常粒成長シミュレーションを行った [12), 13)]．この中で異常粒成長は粒界の方位差が粒界エネルギーと易動度に影響を与えるときに起こると述べている．また，Ye らは CA 法に粒界の異方性を導入することで，異常粒成長をシミュレーションした [14)]．

一方で，析出物のピンニング効果は異常粒成長に重要な役割を果すことが知られている [15), 16)]．実用材においては，こうした析出物は例えば，ミクロ偏析や，浸炭の影響でマトリクスの中に偏在する場合がある．浸炭による析出物への影響を導入して粒成長のシミュレーションを行った例として木下らの報告がある [17)]．彼らは NbC のピンニング効果と浸炭における C 量の影響を導入し，フェーズフィールド法により異常粒成長をシミュレーションした．しかし，粒界の異方性と析出物の分散状態をともに導入したシミュレーションの報告はない．

これまでの CA 法では，結晶粒の方位として，粒番号を割り当てる方法が用いられることが多かった [18)]．この方法はシンプルであるが，後述するように，実際の方位差分布と異なる方位差の分布となってしまう．こういった不確実性を排除すべきである．

本研究では，CA 法を用いて異常粒成長に対する粒界の易動度と析出物の分散状態の両者に着目した．その中で，粒番号よりも，結晶粒方位を割り当てる方法によりシミュレーションを行った．

フェーズフィールド法とは異なり，CA 法では離散的に界面を扱うため，粒界エネルギーの物理的な扱いが可能で，粒成長挙動を直感的に理解することが可能である．また，フェーズフィールド法よりも小さな計算コストで計算が可能である．こうした理由から本研究では CA 法を用いた．

2．計算方法

オーステナイトの粒成長挙動を調査するため，以下に示すように，二次元の CA 法を用いた粒成長モデルを構築した．

初めに粒成長の一般論を CA 法に落とし込むこととする．粒成長速度 v は単位体積当たりの粒成長の駆動力 ΔG と粒界の易動度 M の積として式（1）のように示される．

$$v[x,y] = \Delta G[x,y] \cdot M[x,y] \tag{1}$$

ここで x, yはセルの二次元座標である．単位体積当たりの粒成長の駆動力は粒界の曲率半径を用いて式(2）のように示される．

$$\Delta G = \frac{\sigma[x,y]}{R_{gb}[x,y]} \tag{2}$$

ここで，R_{gb}は曲率半径，σは粒界エネルギーである．また，粒界の易動度は温度依存性があるとされ，式(3）のように示される．

$$M[x,y] = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \tag{3}$$

ここで，M_0は易動度の係数，Qは活性化エネルギー，Rは気体定数，Tは温度である．

式（2）および式（3）に必要な定数についてはすでに多くの知見があるが，曲率を CA 法で扱う方法は一般的ではない．これは CA 法では空間を離散的に分割して扱うためである．本研究ではこの問題を解決するため，Pierre らによる Box Count 法 [19)] を用いることで，曲率による粒成長の駆動力への影響を導入した．Box Count 法では式（4）のように曲率 R_L を表す．

$$R_L[x,y] = \frac{b^3}{n_{others} - b \times \frac{b-1}{2}} \tag{4a}$$

$$n_{others} = \sum_{i,j=-\frac{b-1}{2}}^{\frac{b-1}{2}} \left(1 - \delta^{[x,y],[x+i,y+j]}\right) \tag{4b}$$

$$\delta^{[x,y],[x+i,y+j]} = \begin{cases} 0 \; if \; grain[x,y] \neq grain[x+i,y+j] \\ 1 \; if \; grain[x,y] = grain[x+i,y+j] \end{cases} \tag{4c}$$

ここで，bは Fig. 1に示すような，セル x, yの周囲で考えるべきセル範囲を表す．例えば，b=5であれば第二近接のセルまでを対象として曲率を計算する．n_{others}は周囲の異なる粒のセル数である．$\delta^{[x,y][x+i,x+j]}$はセル x, yとセル $x+i, y+j$とが異なる結晶粒であるとき 1，同一の結晶粒であれば 0である．$grain[x,y]$はセル x, yにおける粒の識別番号である．

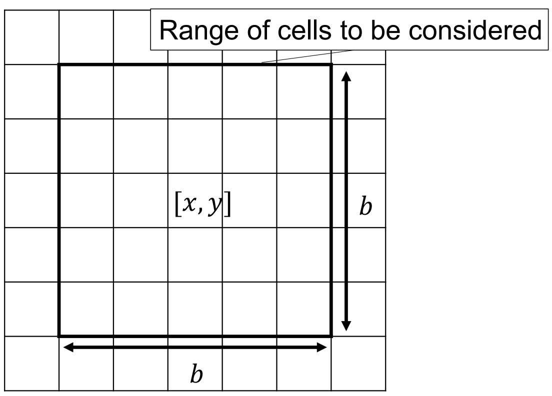

Fig. 1. Schematic of the range of cells considered in the box-counting method.

次に結晶粒の扱いについて述べる．CA 法やフェーズフィールド法ではそれぞれのセルには特定の粒番号を入れることが多い．この手法を用いた場合に二つのセルの間での粒界の方位差 $\theta^{x,y}_{x+i,y+j}$として粒番号の差の絶対値を最大の粒番号で割る式（5)に示す方法がある．

$$\theta^{x,y}_{x+i,y+j} = \frac{\pi}{2}\frac{|grain[x,y]-grain[x+i,y+j]|}{G_{max}} \quad [rad.] \tag{5}$$

ここで，G_{max}は粒番号の最大値である．しかし，次の2点で実組織と異なってしまう．

1. 最大の方位差が 90 ° となってしまうこと．
2. 粒同士の方位差の分布をとると，高角側に向かって単調減少していく方位差分布となってしまうこと．

そこで，本研究では，各結晶粒に粒番号ではなく，実組織と同様に，結晶方位を与えることとした．その際には，計算の都合上，方位を表す四元数を用いることとした．四元数を用いて粒方位を表すことは，例えば高橋ら [20] によって提案されている．

立方晶の結晶 a,b の方位を表す四元数をそれぞれと $\mathbf{q}_a$, $\mathbf{q}_b$ すると，この方位差 $\theta_{a,b}$ は式（6）のように，平易に表される．

$$\theta_{\mathrm{a,b}} = 2\sin^{-1}\left(\min_{1\leqq i\leqq 24}\sqrt{1-(\mathbf{q}_{\mathrm{a}}\mathbf{e}_{\mathrm{i}},\mathbf{q}_{\mathrm{b}})^2}\right) \tag{6}$$

ここで，$\mathbf{e}_i$は立方晶の対称操作を表す 24種類の四元数である．また，($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$）は四元数 $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$の内積を表す．オイラー角や格子ベクトルを用いる場合には，四元数を用いる場合と比較してより複雑な操作が必要であり，四元数を用いることでより低い計算コストで方位差が求められる．また，四元数の 4つの実部は等価な扱いが可能なため，ランダム方位を与える際に，4つの実部に一様乱数を与え，規格化するのみで容易にランダム方位を与えられる利点がある．結晶粒に粒番号を与え，Contieriら [18] による方法で粒界方位差を定義した場合と，直接粒方位をランダムに与える本手法で粒界方位差を定義した場合とで，方位差の分布をそれぞれ Fig. 2(a) および Fig. 2(b) に示す．直接粒方位を与える手法では，理論的な分布 [21] に近い方位差の分布が得られることが分かる．

次に，粒界エネルギーの扱いについて述べる．粒界エネルギーには Read らによる式（7）を適用し，粒界エネルギーの方位依存性を取り入れることとした [22), 23)]．

$$Gb^{x,y}_{x+i,y+j} = E_0\frac{\theta^{x,y}_{x+i,y+j}}{\theta_m}\left(1-\log\left(\frac{\theta^{x,y}_{x+i,y+j}}{\theta_m}\right)\right) \tag{7}$$

ここで，$Gb^{x,y}_{x+i,y+j}$はセル x, yとセル $x+i, y+j$との粒界エネルギー，E_0は高角粒界のエネルギー，θ_mはエネルギーが高角粒界と同じとみなせる閾値である．θ_mは 15 ° を用いた．各セルの粒界エネルギー $\sigma[x, y]$は周囲のセルとの粒界エネルギーの和として，式(8）のように表し，周囲のセルはムーア近傍のセルとした．

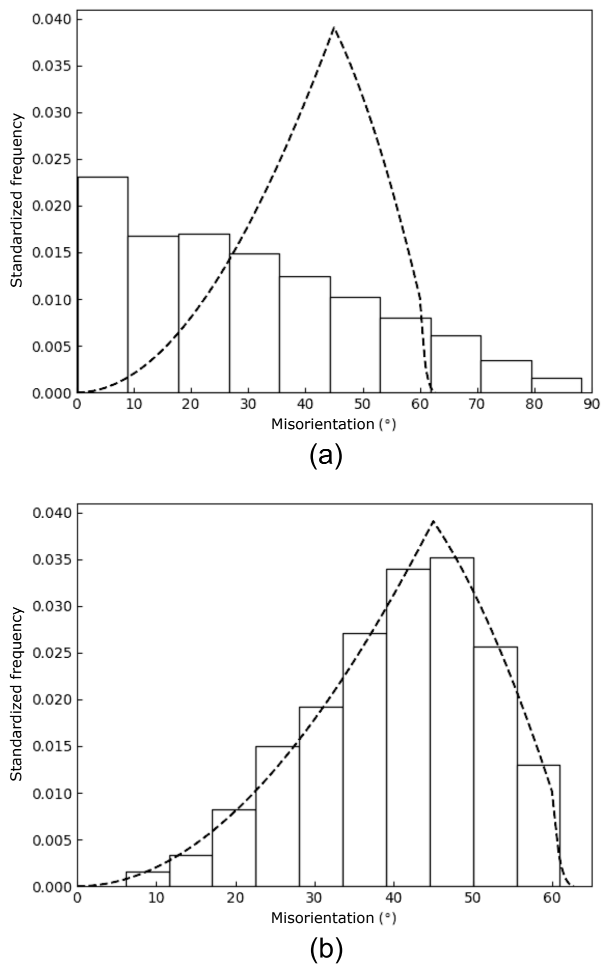

Fig. 2. Distribution of grain boundary misorientation using (a) grain numbers and (b) random crystallographic orientations. Dashed line represents ideal random misorientation distribution.[21]

$$\sigma[x,y] = \sum_{i,j=-1}^{1} Gb^{x,y}_{x+i,y+j}\left(1-\delta^{[x,y],[x+i,y+j]}\right) \tag{8}$$

粒界の易動度については，Humphry ら [24] による式（9）を適用することで，易動度の方位依存性を導入することができる．さらに，易動度の不均一性を考え，特定の粒のみに高い易動度を割り当て，易動度を強調したモデルを考案しシミュレーションを行った．この易動度の強調は例えば，特定の粒のみが周囲の粒と異なる方位や対応粒界を持ち，易動度が高くなる場合などを想定している．

$$M = M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)\left(1-\exp\left(-5\left(\frac{\theta}{\theta_m}\right)^4\right)\right) \quad (9)$$

ここで，θ_mは易動度が大角粒界とほぼ同等になる角度を示し，本研究では 15°を用いた．

$$M = \begin{cases} M_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)\left(1-\exp\left(-5\left(\frac{\theta}{\theta_m}\right)^4\right)\right) \; if\ not\ enhanced\ grain \\ pM_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)\left(1-\exp\left(-5\left(\frac{\theta}{\theta_m}\right)^4\right)\right) \; if\ enhanced\ grain \end{cases} \quad (10)$$

ここで，pは強調する場合の粒界易動度の係数である．

最後に析出物の影響について述べる．熱処理中に析出物は結晶粒界に対してピンニング効果を持ち，結晶粒粗大化を抑制するとされる．Zener によると[25]，ピンニング効果を式（2）に対して導入すると，単位体積当たりの粒成長の駆動力は二次元の Zener の式として，式（11）のように示される．

$$\Delta G[x,y] = \sigma[x,y]\left(\frac{1}{R_L[x,y]} - \frac{3f[x,y]}{2r[x,y]}\right) \quad (11)$$

ここで，f とrはそれぞれ，析出物の体積分率，析出物の半径である．本研究ではこの Zenerの式を用いた．

さらに，組織の中で偏析などの影響により，ピンニング粒子に偏りがある場合を想定して，体積分率fが勾配を持つよう，式（12）に示すように体積分率に分布を与えたときの粒成長挙動を確認した．

$$f[x,y] = f_0\left[\sin\left(\frac{2\pi m y}{Y_{\max}}\right)+1\right] \quad (12)$$

ここで，f_0は平均の体積分率，mはピンニング粒子の偏り度合いを表す整数，$Y_{\max}$は y方向のセルの数である．
前述のように粒成長速度 vは式(1）のように表される．本研究では式(13）に示すように，ΔGが低下するかつ，粒成長速度 vが乱数で与えられるある z値以上であれば，ΔGが最も低下するように，隣接する粒と同じ相になるというルールで粒成長過程をシミュレーションする．

$$\mathrm{grain}[x,y] = \mathrm{grain}[x+i,y+j] \text{ with } \min_{i,j}\left(\Delta G^{\mathrm{after}}_{[x,y]-[x+i,y+j]}\right),$$
$$if \min_{i,j}\left(\Delta G^{after}_{[x,y]-[x+i,x+j]}\right) < \Delta \mathrm{G[x,y]}\ and\ v[x,y] > z \quad (13)$$

ここで $\Delta G^{after}_{[x,y]-[x+i,x+j]}$，はセル $[x, y]$のみがセル $[x+i, x+j]$の粒に置き換わったとしたときのセル x, yにおける ΔGである．zは最大を $z_{\max}$とする一様乱数であり，各セル，ステップごとに更新される．計算全体の流れは Fig. 3に示すフローチャートのとおりである．

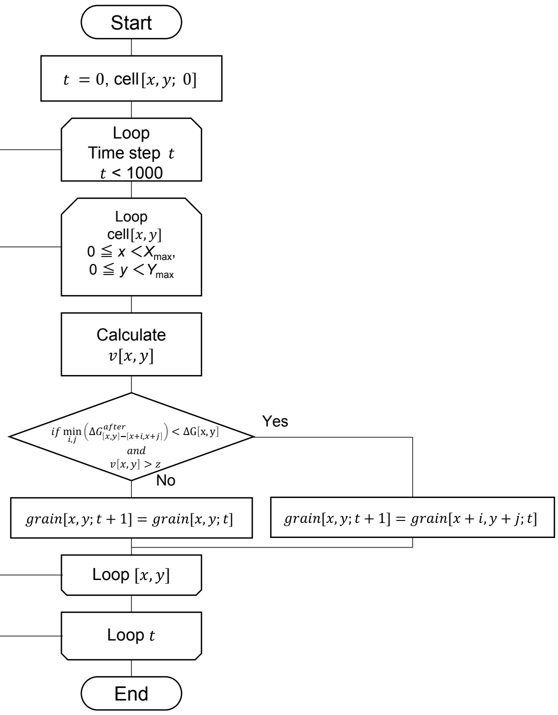

Fig. 3. Overall flow of the CA simulation.

粒成長の CA 法による計算に与える初期組織は相変態による CA 法を基にしたもの[26]とし，平均粒径が異なるいくつかの初期状態からスタートして CA 法による計算を行った．今回は 1 ピクセルを 1 μm として計算し，初期の平均粒径は 3.19 mm である．境界条件は周期的境界条件を用いた．上記シミュレーションは pythonコードおよび C言語によるコードとして計算を行った．計算に用いたパラメータは Table 1のとおりである．

3．結果および考察

まず，易動度を強調せず，析出物がない場合のシミュレーション結果を示す．初期組織，100，500，1000 ステップ後の組織をそれぞれ Fig. 4 に示す．結晶方位は IPF（Inverse Pole Figure）マップで示している．また，平均粒径の推移を Fig. 5 に示す．ここで，点線に示す放物則は式（14）のように表される．

$$< R_g >^2 - < R_0 >^2 = \alpha(\mathrm{t}-\mathrm{t_0}) \quad (14)$$

ここで tは時刻，t_0は基準となる時刻，$\langle R_g \rangle$は時刻 tでの平均粒径，$\langle R_0 \rangle$は初期の平均粒径，αは比例定数である．

Fig. 5 では，初期粒径から計算が落ち着いて，粒成長が開始する時刻を t_0 として，最小二乗法によるフィッティングを行った直線を破線で示している．

平均粒径は Fig. 5 に示されるとおり，放物則に近い推

Table 1. Parameters for cellular automaton.

Symbol	Value	Unit	Description
Q	1.82×10^{6} [27]	J/mol	Activation energy
R	8.314	J/(K·mol)	Gas constant
M_0	4.67×10^{-6} [27]	$m^4/(J \cdot s)$	Coefficient of grain boundary mobility
E_0	0.75 [28]	J/m^3	Grain boundary energy
T	1173	K	Temperature
z_{max}	5×10^{-7}	m/s	Maximum random number
b	7	pixel	Range of cells in the box count method
X_{max}, Y_{max}	150, 150	pixel	Size of calculation cells

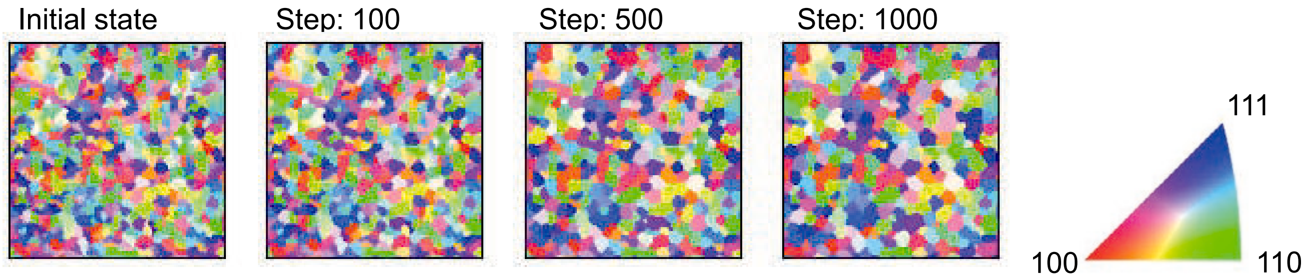

Fig. 4. Microstructures during specific steps.

移を示しており，定常粒成長であると考えられる．

次に，易動度を強調する粒の易動度を 10 倍，強調する粒の数を 10 個とした場合の粒成長挙動を Fig. 6 に示す．易動度を強調したことで，異常粒成長が認められる．易動度を強調したことは，対応粒界や偏析の影響を導入したことに相当すると考えることができる．例えば Olmsted らは対応粒界の易動度が他の粒界よりも非常に高いことを報告している [29]．また，偏析により易動度が低下するとの報告もある [30]．

異常粒成長の発生の基準については，組織内での最大粒径 R_{max} を平均粒径 $<R_g>$ で割った Z_g を基準とし，この値が 3 以上のとき異常粒成長とする．

この時の組織の一例を Fig. 7 に示す．Z_g が 3 より大きい時に異常粒成長が発生していると考えてよい（式(15)）．

$$Z_g = \frac{R_{max}}{< R_g >} > 3 \tag{15}$$

易動度を強調度合いを表す係数 p の影響を Fig. 8 に示す．x 軸に強調の係数 p を，y 軸に 1000 ステップ後における Z_g を示している．このとき，易動度を強調する粒の数は 10 個である．次に，異常粒成長におよぼす強調する粒の数の影響を Fig. 9 に示す．x 軸に強調する粒の数，y 軸に 1000 ステップ後における Z_g を示している．Fig. 8 および Fig. 9 では乱数シード以外の条件を揃えた

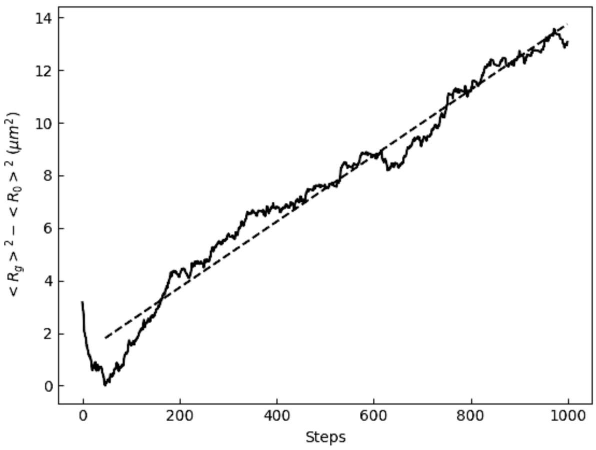

Fig. 5. Time evolution of average grain radius.

上で，異なる 10 の乱数シードを CA 法による計算の前に与えてそれぞれ CA 法による計算を行い，Z_g をプロットしてある．強調する粒の選択と，それぞれのステップごとの変化は乱数に依存するため，結果が乱数シードにより異なってくることとなる．

異常粒成長は易動度の係数が 5 以上の時に発生しはじめており，7 以上では乱数シードによらずすべての場合で発生している．また，易動度を強調する粒の数は 1 つでも異常粒成長が発生するが，初期組織にある粒の数の内，強調する粒の数が 20 % を超えると異常粒成長が発生しない．これは，易動度を強調する粒の数が多くなると，強調された粒のみで定常粒成長となるためである．

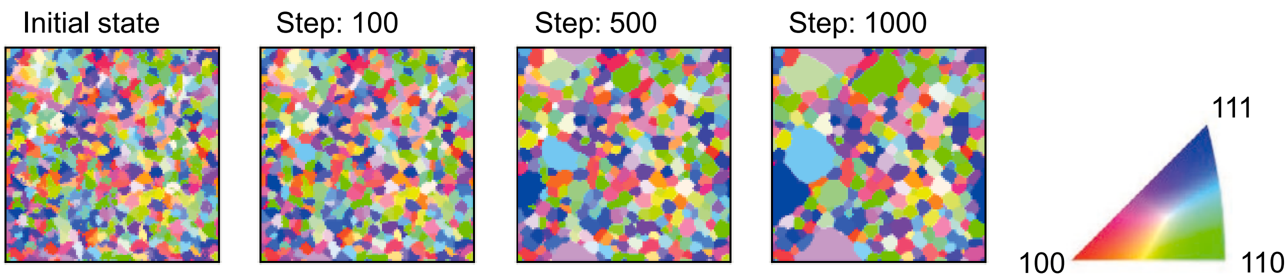

Fig. 6. Microstructures during specific steps in the case of enhanced mobility.

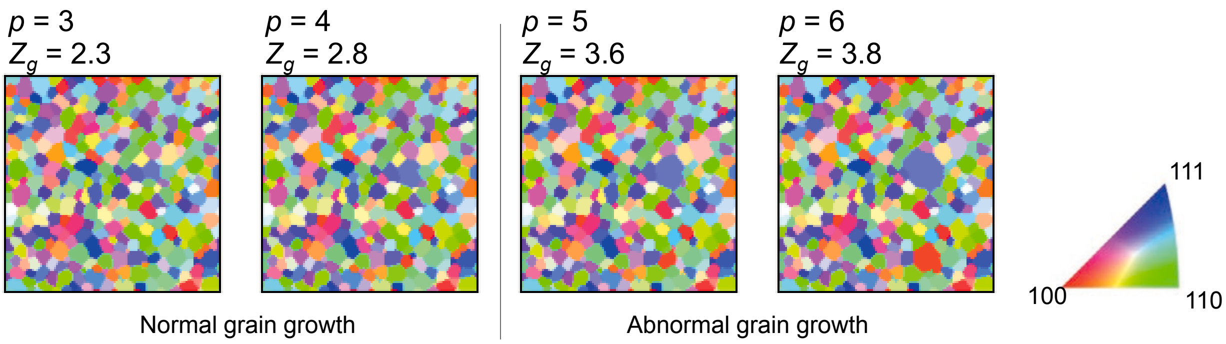

Fig. 7. Effect of mobility coefficient p on the microstructure after 1000 steps.

Fig. 10 に 1000 ステップ後における計算組織に対する析出物の影響を示す．また，Z_g に対する析出物の体積分率 f_0 による影響を Fig. 11 に示す．これらの結果は析出物の体積分率が大きくなると，異常粒成長の発生を抑制することが可能であることを示している．ここでは析出物の半径 r は位置によらず，5 nm で一定とした．また，易動度を強調する粒の易動度を 10 倍，強調する粒の数を 10 個としている．析出物の体積分率に偏りがないとき，析出物の平均体積分率 f_0 が約 6.0×10^{-5} 以上であれば，異常粒成長を抑制することができる．

ここで，Gladman の式[31] との対応関係について議論する．Gladman によると異常粒成長発生の臨界析出物半

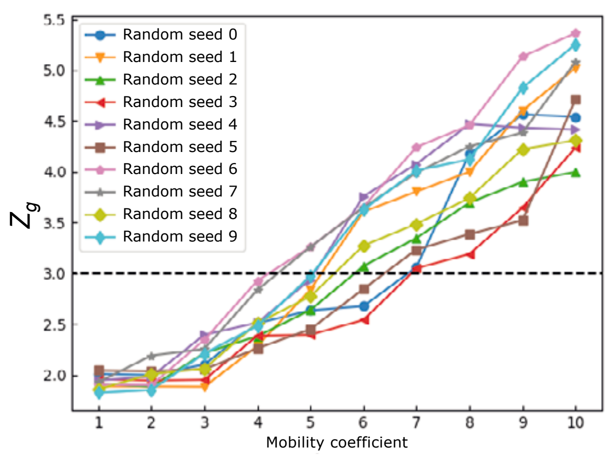

Fig. 8. Effect of mobility coefficient on Z_g after 1000 steps. (Dotted line is abnormal grain growth criteria in Equation (15).)

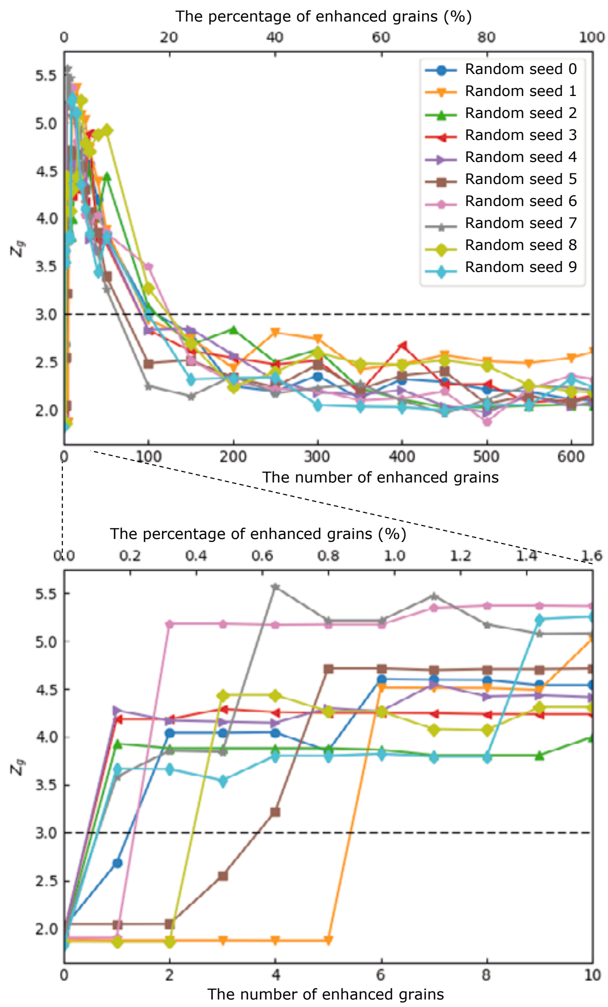

Fig. 9. Effect of the number of enhanced grains on Z_g after 1000 steps. (Dotted line is abnormal grain growth criteria in Equation (15).)

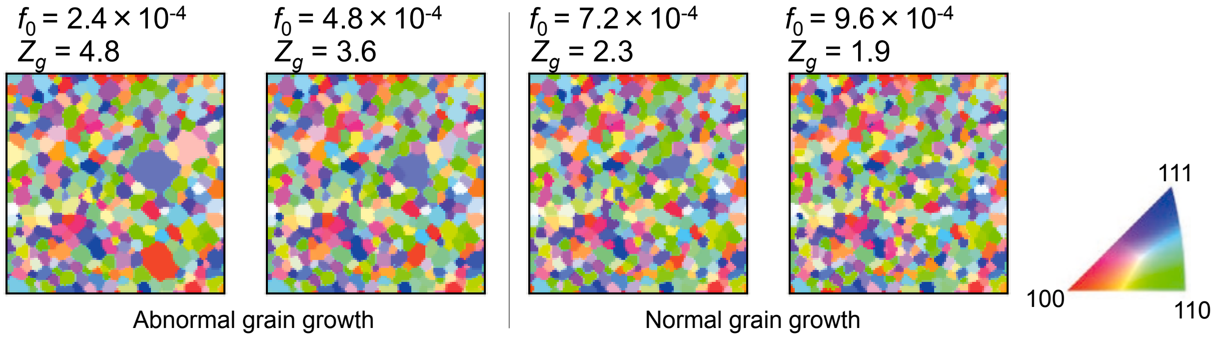

Fig. 10. Effect of the volume fraction of precipitates on the microstructures after 1000 steps.

径 r* は式（16）のとおり表される．

$$r^* = \frac{6R_0 f_0}{\pi}\left(\frac{3}{2} - \frac{2}{Z}\right)^{-1}. \tag{16}$$

ここで Z は初期の Z_g，ピンニング粒子の体積分率を，異常粒成長を抑制できる f_0 = 6.0 × 10^{-5} としたとき，r* = 0.99 nm と計算される．今回計算に用いた析出物粒径は 5 nm であるから，Gladman の式より求められる値よりも約 5 倍大きくなったが，オーダーとしては近い値が得られており，実組織に近い挙動を再現できると考えられる．

析出物の偏りについて，析出物が Fig. 12 の上段のように，偏って存在しているとした場合の 1000 ステップ後の組織を Fig. 12 の下段に示す．*m* が 2 以下の時（偏りのない *m*=0 の時を除く）に，異常粒成長が発生した．加えて，析出物の体積分率が低い部分で異常粒成長が発生している．このように，析出物の体積密度に偏りがあれば，異常粒成長の発生が起こりやすくなる．特に，偏りが大きいほど，異常粒成長が発生しやすくなる傾向にある．このことは，析出物分布の偏りが大きいほど異常粒成長の抑制には不利であることを示す．

以上のように，易動度や析出物の偏りといったこれまで考慮されてこなかった要因について導入した粒成長シミュレーションモデルを提案した．こうした要因も導入したシミュレーションを行うことで，異常粒成長の予測が可能となる．組織制御が容易になることで材料開発への知見が得られると考える．

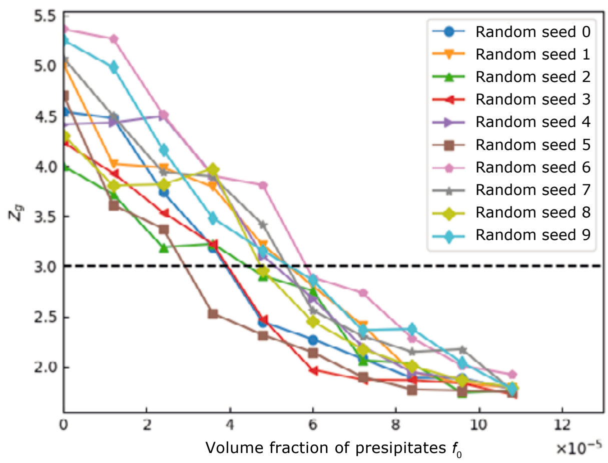

Fig. 11. Effect of the precipitates volume fraction on Z_g after 1000 steps. (Dotted line is abnormal grain growth criteria in Equation (15).)

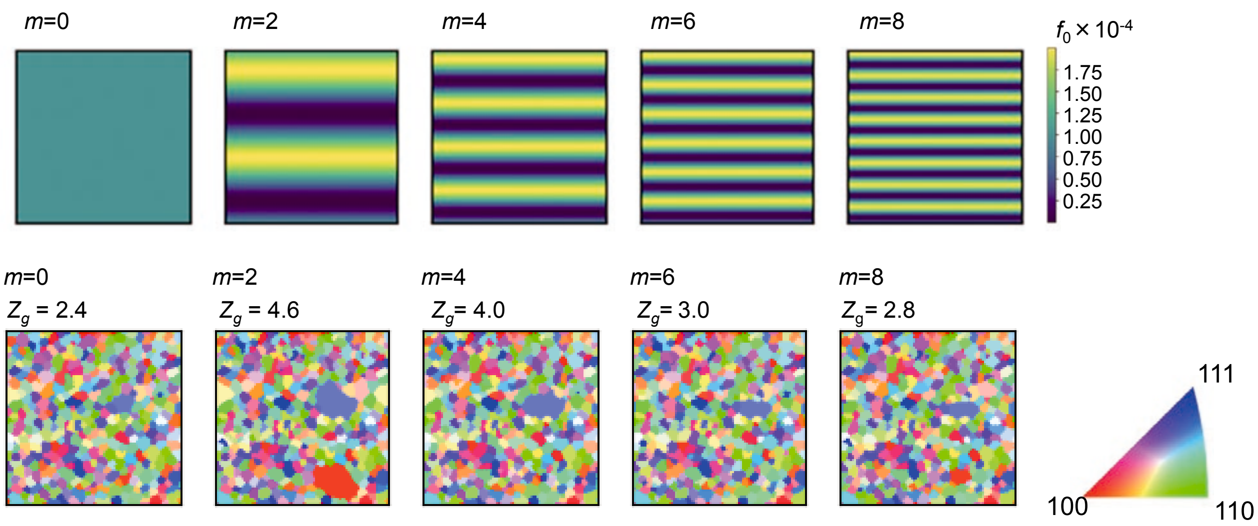

Fig. 12. Effect of the precipitates volume fraction on the microstructures after 1000 steps.

4. 結　言

本研究では，結晶粒方位に実方位を用いたCA法を用いて，異常粒成長の発生および，析出物による異常粒成長の抑制を再現することを試みた．その結果以下の結論が得られた．

1. CA法において，異常粒成長は粒界の易動度を強調することで発生し，強調の程度を 5倍以上とすると異常粒成長が発生する．このことから粒界の易動度の不均一性は異常粒成長発生の一要因であると示唆される．
2. 粒番号ではなく，結晶方位を用いることで，粒界エネルギーと易動度の影響を正確に再現することが可能である．
3. 異常粒成長は析出物のピンニング効果により抑制が可能である．しかし，組織の中で析出物の体積分率に偏りがあり，ピンニング効果が弱い場所がある場合には，異常粒成長の抑制が難しくなる．
4. 以上の結果から，CA法は異常粒成長の再現に用いることが可能であり，浸炭処理などの熱処理中の異常粒成長挙動を再現するのに有効な手段となりうる．

（文　献）

1）瓜田龍実，並木邦夫，飯久保知人：電気製鋼，59（1988），33.
2）O. M. Ivasishin，S. V. Shevchenko，N. L. Vasiliev and S. L. Semiatin：Acta Mater.，51（2003），1019.
3）Y. Saito and M. Enomoto：ISIJ Int.，32（1992），267.
4）H. V. Atkinson：Acta Metall.，36（1988），469.
5）Q. Yu and S. K. Esche：Mater. Lett.，57（2003），4622.
6）Y. J. Lan，D. Z. Li and Y. Y. Li：Metall. Mater. Trans. B，37（2006），119.
7）F. Han，B. Tang，H. Kou，J. Li and Y. Feng：J. Mater. Sci.，48（2013），7142.
8）Y. He，H. Ding，L. Liu and K. Shin：Mater. Sci. Eng. A，429（2006），236.
9）J. Ogawa and Y. Natsume：Comput. Mater. Sci.，199（2021），110729.
10）L. -Q. Chen and W. Yang：Phys. Rev. B，50（1994），15752.
11）C. E. Krill III and L. -Q. Chen：Acta Mater.，50（2002），3057.
12）Y. Hayakawa and J. A. Szpunar：Acta Mater.，45（1997），1285.
13）Y. Hayakawa and J. A. Szpunar：Acta Mater.，45（1997），4713.
14）L. Ye，B. Mei and L. Yu：Metals，12（2022），1717.
15）木下修司，上田武司，鈴木章：鉄と鋼，59（1973），446.
16）紅林豊，中村貞行：電気製鋼，65（1994），67.
17）T. Kinoshita and M. Ohno：Comput. Mater. Sci.，177（2020），109558.
18）R. J. Contieri，M. Zanotello and R. Caram：Mater. Res.，20（2017），688.
19）P. J. P. Pimienta，E. J. Garboczi and W. C. Carter：Comput. Mater. Sci.，1（1992），63.
20）高橋裕，宮沢薫一，森実，石田洋一：日本金属学会誌，50（1986），357.
21）D. C. Handscomb：Can. J. Math.，10（1958），85.
22）W. T. Read and W. Shockley：Phys. Rev.，78（1950），275.
23）A. Mallick and S. Vedantam：Comput. Mater. Sci.，46（2009），21.
24）F. J. Humphreys：Acta Mater.，45（1997），4231.
25）C. S. Smith：Trans. Metall. Soc. AIME，175（1948），15.
26）大笹憲一，棗千修：鉄と鋼，102（2016），157.
27）S. Dépinoy，B. Marini，C. Toffolon-Masclet，F. Roch and A.-F. Gourgues-Lorenzon：Metall. Mater. Trans. A，48（2017），2289.
28）H. S. Zurob，Y. Brechet and G. Purdy：Acta Mater.，49（2001），4183.
29）D. L. Olmsted，E. A. Holm and S. M. Foiles：Acta Mater.，57（2009），3704.
30）J. W. Cahn，P. Fife and O. Penrose：Acta Mater.，45（1997），4397.
31）T. Gladman：Proc. R. Soc. Lond. A，294（1966），298.


村田憲治


福井ちひろ


孫　飛


陳　達徳


足立吉隆