

1. 緒言

材料組織の特徴付けは、これまで主に長さや、面積、体積といった「量」を定量化することによって行われてきたが、最近では入り組み度や、連結度といった「位相幾何学（トポロジー）」に関する情報も解析の対象となってきた。トポロジーの情報を得るためには組織の三次元(3D)構造を知る必要がある。3D グラフィックス技術の発達は近年著しく、医療・材料・建設など各分野へ適用がすすめられている。その対象サイズは、ナノスケールオーダーからキロメートルオーダーまで広い。三次元可視化を実験的に行うに際し、対象サイズに応じて種々の方法が開発されている。対象サイズが大きいほうから、中性子線・X線トモグラフィー法[1]、シリアルセクショニング SEM/EBSD 像の三次元再構築法[2]、TEM トモグラフィー法がある[3]【三次元可視化】。

本報告では、位相幾何学に基づいて 3D 組織像を定量化する試みについて述べる。この知見をパーライト組織に適用した結果についても触れる。

2. 3D SEM/EBSD 法

2.1 三次元可視化手法

2.1.1 三次元化事例

研磨と、観察を繰り返すことによって得たシリアルセクショニング像を、コンピューター上で位置補正（アライメント）をした後、ネットを掛けて連続化（レンダリング）することによって三次元像が得られる。得られた三次元像は、任意の方向から観察することができ、任意の断面像を見ることも可能である。一例として、シリアルセクショニング像を模した Fig.1 のような連続像をレンダリングソフトウェア（ここでは MAVI を用いた）で三次元再構築した結果を Fig.2 に示す。(a)は母相の直方体、(b)は貫通した tunnel を一つ含む直方体、(c) tunnel と空洞をそれぞれ一つずつ含む直方体である。

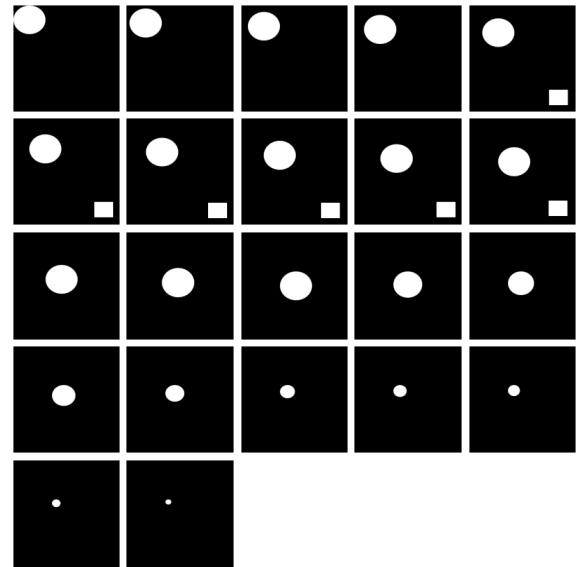


Fig.1 画像処理ソフトで作成した複数の断面図

実際のシリアルセクショニング像を三次元再構築した例を Fig.3-5 に示す。詳細を Table 1 に示す。具体的なシリアルセクショニング法については参考資料[2]を参照していただきたい。ラスマルテンサイト (Fig.3) のパケット組織が入り組んでいること[4]、パーライト中 (Fig.4) のラメラ組織が捩じれていること[5]、bcc 相が粒界面よりも、粒界エッジやコーナーに優先析出していること (Fig.5)[6]など、これまでの二次元観察ではわからなかった新しい知見が見出されるようになってきている。

共析パーライト組織から一枚のセメンタイト板のみを抽出した像を Fig.6 に示す (AVS express を使用)。セメンタイトには複数の穴があいていることが明らかとなった。

Table 1 三次元可視化手法

	対象とした組織	シリアルセクション法	三次元可視化ソフト
Fig.2	Tunnel、空洞を含む直方体	Photoshop で作成	MAVI
Fig.3	ラスマルテンサイト[13]	手動機械研磨	IMOD[16]
Fig.4	共析パーライト[14]	Double beam FESEM	IMOD
Fig.5	fcc 母相の粒界面、エッジ、コーナーに析出した bcc 相[15]	手動機械研磨	AVS express (UNIX)
Fig.6	共析パーライト	Double beam FESEM	AVS express (windows)
Fig.10	部分球状化パーライト	Double beam FESEM	AVIZO

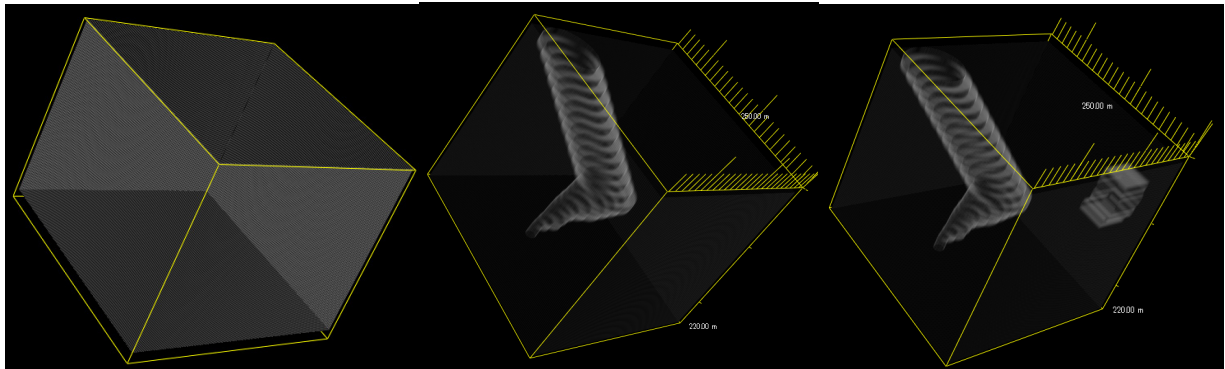


Fig.2 Tunnel、空洞を含む直方体の三次元可視化像 (a)直方体、(b)貫通した tunnel を一つ含む直方体、(c) tunnel と空洞をそれぞれ一つずつ含む直方体(Fig.1 の断面図は(c)に対応)

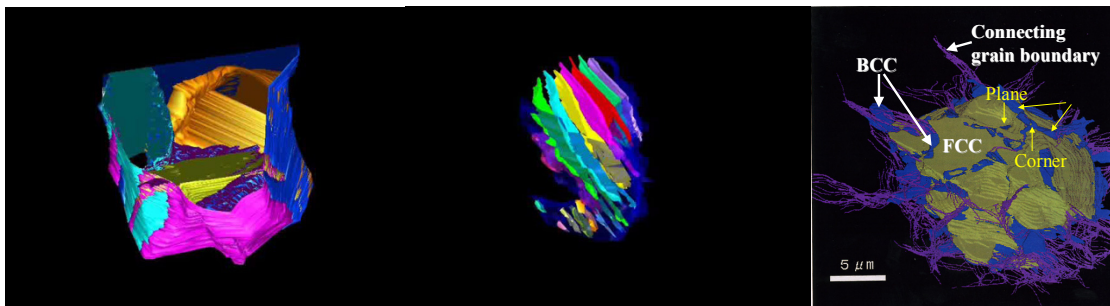


Fig.3 ラスマルテンサイト[4] Fig.4 共析パーライト[5] Fig.5 fcc 相中に析出した bcc 相[6]

2.1.3 3D 像の質向上

コンピュータ上でシリアルセクショニング像を重ねる際に、実際には連続しているのにもかかわらず、レンダリングソフトが連続しているとは判断せず、一枚の面を構成せず、不連続になってしまう場合がある(Fig.6a)。この場合、セクショニング間を補完する(b)ことによって一枚の面とするモジュールが用意されている。さらに、複数の補完を入れることによって表面に微小な凹凸ができるのを防ぐために、面を構成するポリゴンを減少させて平滑な面にする(c)モジュールも用意されている。セクショニング間の補完による面の連続化は、3D 像をもとにして求めた体積値の信頼性を上げる際に重要であり、一方、面の平滑化は表面積の算出値の信頼性を上げるときに重要となる。

2.2 3D 像の定量化手法

得られた 3D 像を定量化し、材料特性と関連付けることが重要な課題の一つになっている[7]。組織形態を評価する際に通常用いられるパラメーターは結晶粒径、体積率である。しかしながら、たとえ同じ結晶粒径・同じ体積率の組織であっても、第二相の連結度、入り組み度（しわしわ率）が異なる場合があり、それが材料の信頼性や機械的特性に影響していることも考えられる。ここでは、組織の連結度や入り組み度を種数(g)、ガウス曲率(K)、オイラー評数(χ)を使って表現する手法について述べる。

組織の 3D 幾何学を議論する際に基本となるのは位相幾何学の分野で有名な(1)式のオイラー・ポアンカレの公式である。

$$\chi(X) = \sum_{k=0}^{\dim X} (-1)^k \cdot b_k(X) \quad (1)$$

ここで $\dim X$ は今対象とする物体 X の次元である。 $b_k(X)$ は X の k 次元ベッチ数と呼ばれるもので、物体 X の k 次元の位相的な特徴を表す数である。(1)式を 2 次元、3 次元に対して書き下して見ると、

$$\chi(2) = (-1)^0 \cdot b_0(X) + (-1)^1 \cdot b_1(X) + (-1)^2 \cdot b_2(X) = b_0(X) - b_1(X) + b_2(X) \quad (2)$$

$$\chi(3) = (-1)^0 \cdot b_0(X) + (-1)^1 \cdot b_1(X) + (-1)^2 \cdot b_2(X) + (-1)^3 \cdot b_3(X) = b_0(X) - b_1(X) + b_2(X) - b_3(X) \quad (3)$$

がそれぞれ得られる。ここで、X の 0 次元～3 次元ベッチ数は

$b_0(X)$ = X の vertex の数 v

$b_1(X)$ = X の edge の数 e

$b_2(X)$ = X の face の数 f

$b_3(X)$ = X の cell の数 c

で与えられる。したがって、物体 X の表面の話だけを考えようという立場ならば、2 次元の話であり、

$$\chi(2) = v - e + f \quad (4)$$

を使うことになり、一方 X を中身のつまった 3 次元の物体（数学では多様体という）として考えるとい

うことであれば、

$$\chi(3)=v \cdot e+f \cdot c \quad (5)$$

となる。

例えば、立方体のオイラー評数は、 $V=8$, $e=12$, $f=6$, $c=1$ であることから、サイズによらず常に、 $\chi(2)=2$, $\chi(3)=1$ となる。三角柱や、四角錐など、膨らませれば球に近付くと閉じた立体のオイラー評数も $\chi(2)=2$, $\chi(3)=1$ となる。このオイラー・ポアンカレの公式は、立体を構成する面を多角形（通常、三角形）でどれだけ細分しても成立し、オイラー評数は長さや、面積に依存しない不変量である。

オイラー評数、ガウス曲率の全積分値(K_{total})、種数(g)の関係は以下で与えられる。

$$g=1-K_{total}/4\pi=1-\chi(3) \quad (6)$$

g は規定の空間を貫通した領域（トンネルあるいはハンドルと呼ばれる）の数 h と、独立した閉じた空間（ボイド）の数 v 、独立した対象物の数 b を使って、次式でも与えられる。

$$g=h \cdot (v+b)+1 \quad (7)$$

いま、(5)式よりオイラー評数が求められれば、(6)式よりガウス曲率、種数が得られる。この(6)式はガウス曲率といった「微分幾何学」で得られる特徴値と、オイラー評数、種数といった「位相幾何学」の特徴値を結び付ける Gauss-Bonnet の定理と呼ばれる。逆に、局所的なガウス曲率を求めて、その積分値が分かれば、種数やオイラー評数が算出できる。さらに、(7)式により、現在調べている空間すべてについてボイドあるいは球状の析出物の数、対象物の数を求めれば、(6)式で得た種数の値を用いてハンドルあるいは棒状の析出物が求められるのである。

Fig.2,6c で示した直方体のガウス曲率の積分値、種数、オイラー評数、表面積、体積、密度を求めた結果を Table 2 にまとめて示す（解析には MAVI を用いた）。

Table 2 実測したガウス曲率の積分値(K_{total})、種数(g)、オイラー評数(χ_3)、表面積(s)、体積(v)、密度(ρ)

	K_{total}	g	$\chi(3)$	s	v	ρ
Fig.2a	4π	0	1	-	1375000	1.00
Fig.2b	0	1	0	315187	1288060	0.94
Fig.2c	4π	0	1	325522	1282560	0.93
Fig.6c	-12π	4	-3	-	-	-

ここでガウス曲率(K)とは、ある点における主曲率（最大曲率と最小曲率）の積である。サッカーボールやフットボールはどの点においても最大曲率、最小曲率ともに正の値となるので、ガウス曲率は正となる (Fig.8 左例)。棒状の物体(中列)は最大曲率は正であるが、最小曲率は負となるのでガウス曲率はゼロであ

る。馬の鞍状(右列)のように入り組んだ物体では最大曲率は正で、最小曲率は負のためガウス曲率は負の値をとる。**Fig.9** の模式図に示すように、卵パックのような入り組んだ物体はガウス曲率は正、負の値を交互に取ることになる。またその“でこぼこ度”はガウス曲率の絶対値が大きいほど大きくなる。このほか、物体の形態を表す曲率として、平均曲率(H)があり、これは主曲率(最大と最小曲率)の平均値で表わされる。平均曲率は湾曲度を表しており、Gibbs-Thompson 効果を議論する際に表面エネルギーと密接に関係している重要な因子の一つである。

いま個々の場所でのガウス曲率が求まったとする。その積算値 K_{total} から、(6)式を通してオイラー評数(χ)や、種数(g)が求まる。また、対象物のラベリング数から物体の数(b)が求まり、一方母相(バックグラウンド)のラベリング数からボイドの数(v)が求まる。したがって貫通した穴(ハンドルあるいはトンネル)の数(h)が(7)式から求められる。

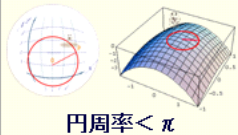
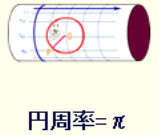
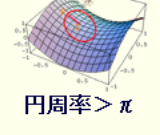
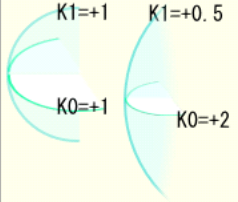
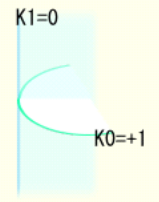
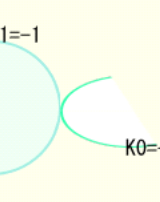
『しわしわ率+』の空間	『しわしわ率0』の空間	『しわしわ率-』の空間
 円周率 $< \pi$	 円周率 $= \pi$	 円周率 $> \pi$
 $K1=+1$ $K0=+1$ $K0=+2$	 $K1=0$ $K0=+1$	 $K1=-1$ $K0=+1$
$K=K0 \times K1=+1$ (正の曲率)	$K=K0 \times K1=0$ (0の曲率)	$K=K0 \times K1=-1$ (負の曲率)

Fig.8 ガウス曲率(K)と主曲率($K0, K1$)の説明[8]

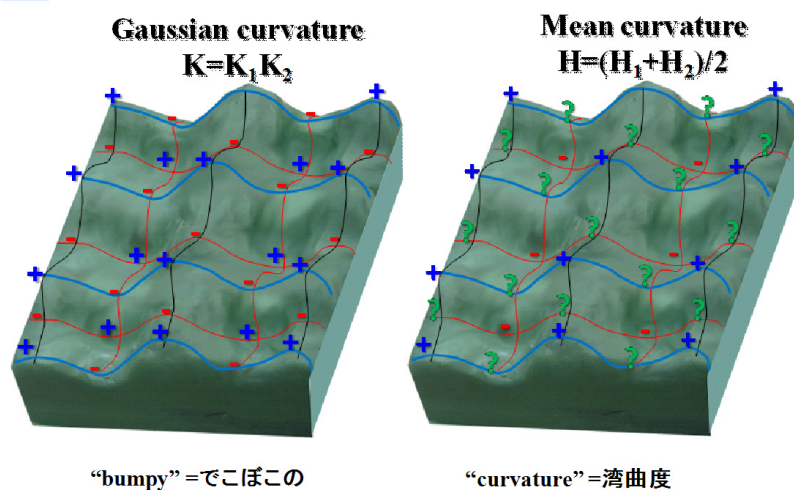


Fig.9 ガウス曲率(K)と平均曲率(H)の説明

2.3 3D パーライト組織の定量解析[9]

パーライト組織のセメンタイトには複数の穴（フェライトで埋まっている）があいていることを Fig.6 に示した。熱処理過程でこのセメンタイトがどのように球状化するかについて興味を持たれる。Fig.10 は部分球状化処理した共析鋼のパーライト組織である。セメンタイトの形態は板状からリボン状に変化していることが分かる。更に詳細をみるために、特徴的なセメンタイトの形態を表示したものが Fig.11 であり、二股に分かれているセメンタイトや、くびれているセメンタイト、穴が一方方向に伸びたセメンタイトが観察される。これらの観察結果から、球状化過程でセメンタイト板の穴が一方方向に成長し、セメンタイトの形状が板状からリボン状に変化し、リボン状のものがやがれくびれて分断して球状化が進むものと考えられる。穴の成長に関しては、E.Werner ら[10]が理論的にも報告しており、今後この穴の三次元形態の定量化を進める必要がある。なお、ここで示した 3D 部分球状化パーライト組織の位相幾何学に関する値を Table3 に示す。下記の b_v, g_v, v_v, h_v は単位体積当たりの値(b_v, g_v, v_v, h_v)で示している。

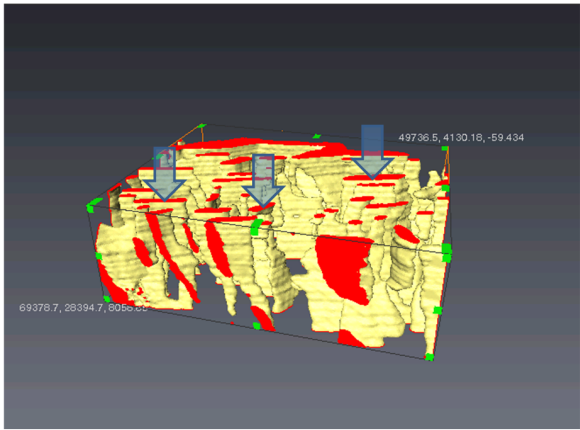


Fig.10 部分球状化パーライト(973K1hr)

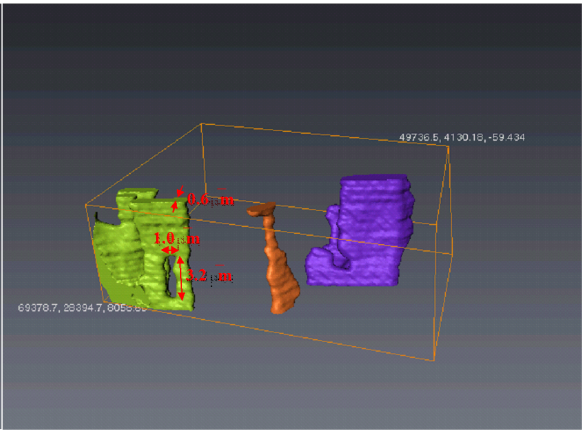


Fig.11 Fig.10 中の個々のセメンタイト形態

Table 3 部分球状化パーライトの位相幾何学情報

Aging time at 973K, (s)	$b_v(m^{-3})$	$g_v(m^{-3})$	$v_v(m^{-3})$	$h_v(m^{-3})$
1hr	1.56757E+16	1.26244E+17	0	1.41919E+17

2.4 モデリング・シミュレーションとの連携

3D 像はノードを線（エッジ）で結んだ小さなポリゴンで構成されている(Fig.12)。一つ一つのノードの座標やガウス曲率をアスキーファイルで保存することができる。連続度は種数（genus）で表現することも可能となった。これらの位相幾何学的特徴値は、たとえば Dual phase 鋼中のマルテンサイトの形態を表すのに有効であり、マルテンサイトの体積率や硬度とともに、これらの位相幾何学的特徴値を考慮した機械的特性の有限要素法モデリングが期待される。また熱処理時には、局所的な平均曲率と表面エネルギーの対応関係より、組織変化のモデリング（フェーズフィールド法など）への展開が期待される。

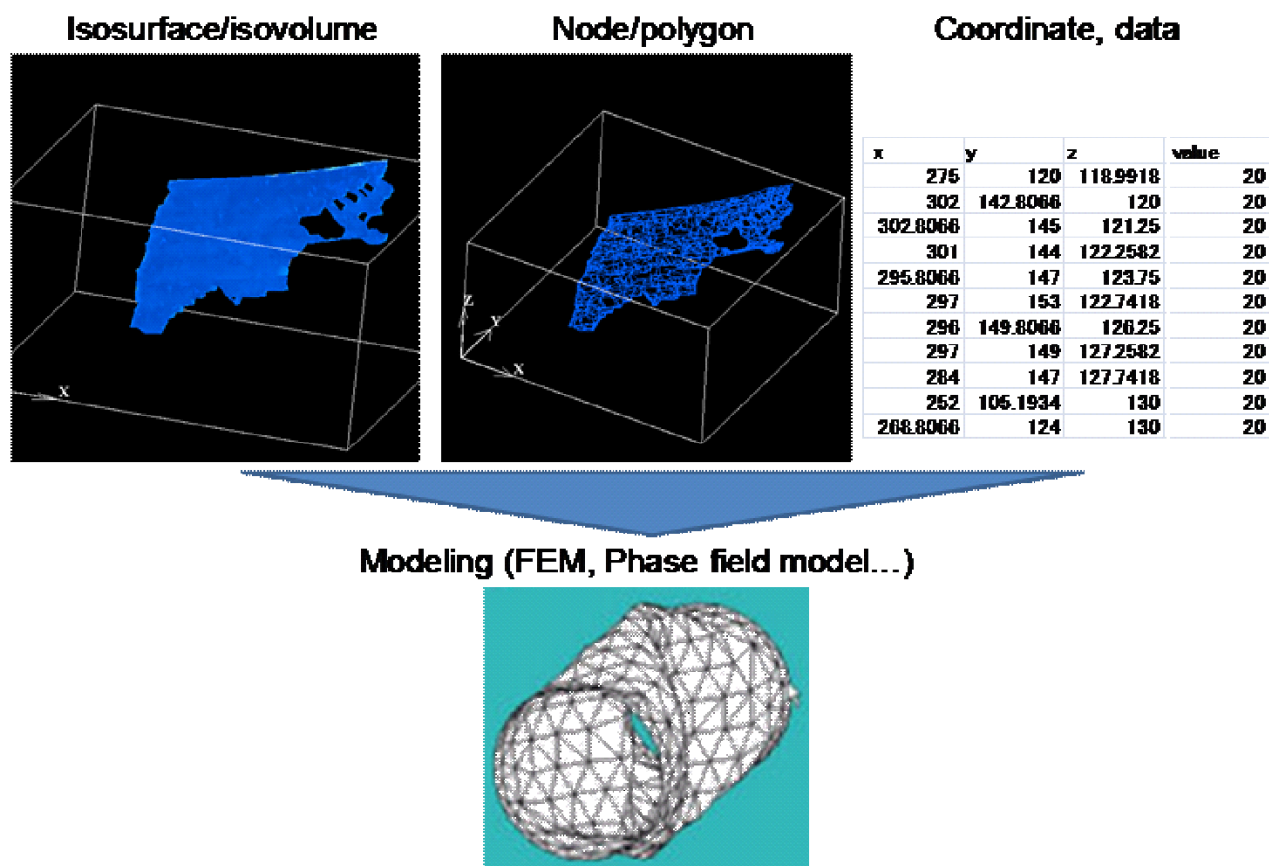


Fig.12 アスキーファイル形式で保存したノードの座標、データ（曲率など）のモデリングへの展開

3.まとめ

材料組織の連結性、入り組み度を評価するために、3D 像の位相幾何学的解析手法の妥当性を検討した。組織の入り組み度（でこぼこ度）はガウス曲率および種数で評価することが可能である。パーライト組織に於いては、複数の貫通している穴がセメントタイト中に開いており、球状化はこの穴が一方向に成長することをきっかけに開始するものと思われる。今後、時効処理による穴の位相幾何学情報の変化を評価することにより、球状化過程の本質に迫れるものと期待される。

謝辞

本研究は、JFE21世紀財団技術研究助成より助成を受けて実施しました。関係各位に深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] H. Toda, I. Sinclair, J.Y. Buffière, E. Maire, K.H. Khor, P. Gregson and T. Kobayashi: Acta Materialia 52(2004) 5, 1305.
- [2] 足立吉隆：ふえらむ， 13(10)(2008), 676.
- [3] P. A. Midgley, M. Weyland: Ultramicroscopy, 96(2003), 413.

- [4] Y. Edamatsu, S. Morito, T. Ohba and Y. Adachi.: Netsu-syori, 49(2009), 632.
- [5] Y. Adachi, S. Morooka, K. Nakajima and Y. Sugimoto: Acta Materialia, 56(2008), 5995.
- [6] T. Takeuchi, Y. Adachi, D. Dorner, M. Enomoto: Materials Science Forum, 561-565(2007), 69.
- [7] R. Mendoza, K. Thornton, I. Savin, P.W. Voorhees: Acta Materialia, 54 (2006),743.
- [8] http://www.geocities.jp/maeda_hashimoto/tor/tor_ch02pr03p04.htm
- [9] W. T. Wang and Y. Adachi: Unpublished work, (2010).
- [10] E. Werner: Materials Science and Engineering, A132(1991),213.