

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 大出真知子

近年のコンピューター性能向上に伴い、凝固問題に対してもさまざまな数値解析手法が開発されてきた。なかでもフェーズフィールド法は明確な理論背景とともに界面における局所平衡条件、急速凝固時非平衡現象の再現の点からも、今後の発展が期待されている。本研究は、これまでのフェーズフィールド法を多元合金系に拡張するとともに、これを凝固マイクロ組織形成予測へ適用に関する問題に対する研究をまとめたものであり、6章よりなる。

第1章は緒論であり、本研究の背景と目的、関連分野での位置付けについて述べている。まず、凝固マイクロ組織予測手法としてのフェーズフィールド法の有用性と位置付けを述べている。次に、フェーズフィールド法理論の発展経緯を概説し、フェーズフィールドパラメータの重要性を述べるとともに、これまでの解析例が定量性と実用性に欠く点を指摘している。このような背景から、フェーズフィールド法を3元合金系への拡張し、これまでの手法では困難とされる凝固諸問題、すなわち、粒子/界面問題、組織粗大化過程、初期凝固組織過程に対するフェーズフィールド法解析の適用を検討する本研究の目的を述べている。

第2章では、合金系フェーズフィールドモデルの希薄溶液近似による3元系への拡張と、thin interface limit パラメータの導出について述べている。そして、導出モデルの妥当性を局所平衡状態により確認するとともに、Fe-C-P合金を例とした1次元マイクロ偏析解析、2次元等温デンドライト成長解析の結果について述べている。特に、リン濃度のデンドライト形状に与える影響を詳しく検討し、微少なリン添加により界面が不安定化し、デンドライト組織が著しく微細化することを示している。そして、これらの解析結果から、3元系に拡張されたフェーズフィールド法が実用合金の凝固組織解析に有効であることを示している。

第3章では、合金固液界面と介在物粒子の相互作用に対するフェーズフィールド法の適用について述べている。ここでは、フェーズフィールド法により求められる界面形状を用い、界面変形深さに対する全界面エネルギーの変化率に比例し、界面-粒子間距離により減衰する粒子押し出し力を定義し、これと流体の粘性に起因する粒子捕捉力の2つにより粒子の運動を記述している。このモデルにより、鋼中のアルミナ粒子の凝固界面による押し出し/捕捉挙動を解析し、粒子捕捉臨界速度が求められること、この臨界速度は粒子半径の減少とともに増加し、溶質濃度の増加に対し極小値を持つことを述べている。

第4章では、フェーズフィールド法の粗大化現象へ適用した解析について述べている。ここで

は、等温条件下での粗大化過程としてオストワルド成長を、相成長を伴う粗大化過程としてデンドライト2次枝成長を取り上げて解析している。まず、オストワルド成長の解析では、同径の粒子でも周囲の粒子分布に依り成長／消失速度が異なること、規格化粒子径分布は時間不変であり、平均半径は時間の1/3乗に比例すること、固相率増加に対して粒系分布は幅広く対称形近づくことを示している。デンドライト2次枝成長の解析では、2次枝の競争成長により枝間隔の粗大化が生じ、得られた2次枝間隔は実験結果と一致することを示している。さらに、合金系により2次枝間隔の部分凝固時間指数が異なること、この指数は液相線温度勾配と平衡分配係数に依存し、解析結果から得られた相関式により表されることを述べている。

第5章では、初期組織形成過程などの温度場の影響が無視できない系に対するフェーズフィールド法の適用性を検討した結果を述べている。ここでは、ダブルメッシュ法および並列計算法により温度場連成計算に伴う計算時間短縮方法を述べるとともに、鋼のストリップキャストリングを想定した初期凝固組織の形成過程の解析について述べている。この解析により、初期固相からの成長、セル成長、デンドライト成長の過程を明らかにし、解析により得られたデンドライト1次、2次枝間隔が実験値とほぼ一致することを示している。また、デンドライト先端近傍温度分布の詳細な検討により、その成長が一方向自由デンドライト成長と見なせることを述べている。さらに、熱流方向と優先成長方位のずれ角、第3元素の形成組織に対する影響の検討結果を述べている。

第6章では、本論文の総括とともにフェーズフィールド法の今後の発展について述べている。

以上、要するに本論文はフェーズフィールド法の拡張と凝固組織形成過程の解析を通じ、フェーズフィールド法の実用的価値を明らかにしたものである。これは材料製造プロセスと材料組織制御等の金属工学の進展に寄与するところが大きく、よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。