

## 審査の結果の要旨

氏名：立山真司

鉄鋼材料における異相結晶界面構造と相変態界面キネティクスの理解は材質制御にとって重要な要素として多くの実験的研究がなされてきた。一方、界面構造や相変態の研究における数値解析手法の最近の進歩は著しく、とりわけ古典分子動力学法は原子運動を直接解析する手法として期待されている。分子動力学法の適用は原子間ポテンシャルに依存するが、代表的ポテンシャルである Finnis-Sinclair ポテンシャル（以下、FS ポテンシャル）は鉄の面心立方結晶（fcc）相から体心立方結晶（bcc）相への変態を再現し、その詳細な解析も可能である。本論文はそのような視点から分子動力学法による鉄の fcc-bcc 変態の解析、逆変態を解析可能な新規ポテンシャルの開発、開発ポテンシャルを用いた相変態界面キネティクスと異相界面エネルギーの解析に関する研究成果をまとめたもので、6章よりなる。

第1章は緒論であり、本論文の研究の位置付けとその目的を述べている。

第2章では本論文で用いられる分子動力学法解析手法について述べている。すなわち、解析対象によって異なる部分をのぞき、第3章以降に共通した分子動力学法の計算方法、FS ポテンシャルの性質、異相界面モデル作成方法、計算結果として得られる原子座標データの可視化処理方法のそれぞれについて詳述している。

第3章では、実験的に観察される bcc(110)//fcc(111)界面である Nishiyama-Wassermann 関係（以下、N-W 関係）、Kurjumov-Sachs 関係（以下、K-S 関係）およびその中間の界面関

係について、熱緩和過程で生じる fcc-bcc 変態界面キネティクスを解析した結果を述べている。これらを解析した結果、N-W 関係およびそれから  $2^\circ$  回転させた界面関係では平面的な変態が進行すること、N-W 関係から  $4^\circ$  回転させた界面関係および K-S 関係では最初の平面的な変態の後に、針状の変態形態へと遷移・進行することを示した。また、これらの変態過程の差異は初期界面整合領域分布の差異に起因することを明らかにした。さらに、この界面整合領域は原子応力の小さな部分に一致し、原子応力を用いた可視化により変態開始点や進行方向が明確化されることを示した。

第4章では、鉄における fcc-bcc 変態および bcc-fcc 変態を再現する原子間ポテンシャル開発について述べている。ここでは、鉄 fcc-bcc 変態の定性的再現する FS ポテンシャルでは bcc 結晶と fcc 結晶の最近接原子数を基準に電荷密度項の計算原子数を決定していることから、FS ポテンシャルの電荷密度項に影響距離とカットオフ関数を導入したモデルを提案している。そして、影響距離を変化させた場合の bcc 結晶および fcc 結晶の物性変化を検討し、影響距離  $3.20 \text{ \AA}$  付近を境として結晶安定性が入れ替わること、カットオフ関数を導入しても FS ポテンシャルが保証する結晶の力学物性値は変化しないことを確認している。さらに、開発ポテンシャルを用いて N-W 関係の界面キネティクスを解析した結果、結晶安定性に従って界面移動方向が変化し、界面停止する平衡状態も存在することを示している。この新規ポテンシャルは鉄の変態および逆変態過程の解析に適用可能であると同時に、FS ポテンシャルの性質を包含するものであることを明らかにしている。

第5章では、前章で開発した鉄の再現する新規ポテンシャルを用いて平衡温度（以下、A3 点）前後における変態および逆変態の分子動力学法解析を行った結果、特に、N-W 関係を  $0^\circ$ 、K-S 関係を  $5.26^\circ$  として様々な角度に回転した bcc(110)//fcc(111) 界面関係のモデルにおける相変態界面キネティクスと界面エネルギーを検討した結果を述べている。全てのモデルで A3 点より低い温度では fcc-bcc 変態が生じ、逆に A3 点より高い温度では bcc-fcc 変態が生じることを示している。また、fcc-bcc 変態過程では N-W 関係から K-S 関係に至る

範囲で第3章と同等の結果が得られること、N-W 関係から K-S 関係にかけて平面的成長の速度が遅くなる傾向が見られ、全体としては K-S 関係で平面的成長速度は極小となり、 $16^\circ$  回転の界面関係で極大、 $26^\circ$  回転の界面関係で極小の界面移動速度を持つことを明らかにしている。一方で界面エネルギーの明確なカスプは見られず、界面移動速度との相関性は観察されないことを明らかにしている。

第6章は本論文の総括である。

以上、本論文は分子動力学法を用いることにより鉄の相変態界面キネティクスを解析することの有効性を実証した後、FS ポテンシャルを基にした新規ポテンシャルを開発することにより分子動力学法による鉄固相変態解析の適用範囲を従来の fcc-bcc 変態から双方向変態領域まで大きく拡張し、鉄の変態界面キネティクスに新たな知見をもたらすものであり、材料工学に寄与するところ大である。

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。