

## 審査の結果の要旨

氏名 上田 駿

本論文は、溶鉄中微量元素の熱力学的性質に関する問題に対して実験および理論の両面からアプローチした研究であり、全7章からなる。

第1章では、鉄鋼製錬プロセスにおいて溶鉄中微量元素の熱力学的性質に関する情報が重要であることが述べられている。その上で、反応性や蒸気圧が高い元素に関するデータが不足していること、また未知のデータの理論予測手法が不足していることが示されている。これらの問題点に対する解決方策として、気体流通法を応用した新しい測定手法の開発と、熱力学的摂動論を用いた理論計算手法の確立を提案している。

第2章では、気体流通法を応用した新しい化学平衡測定手法の原理および手法と、その手法によるテルルガスの溶解反応の標準ギブズエネルギーの測定結果が示されている。この結果により、溶鉄中のテルルが同族元素である酸素や硫黄に比べ熱力学的に不安定であることが定量的に示された。また、これらの元素の溶鉄中における熱力学的性質が、鉄化合物の熱力学的性質と定量的に対応していることが見出されている。

第3章では、前章において確立した手法を応用し、溶鉄中テルルの熱力学的性質に対するアルミニウム、硫黄、クロム、マンガン、銅、モリブデンの影響が定量的に測定され、溶鉄中におけるこれらの元素のテルルに対する相互作用パラメータが決定されている。さらに、熱力学的溶液モデルを基にした経験式が考案され、測定された相互作用パラメータが化合物の熱力学的性質と対応していることが示されており、測定値の妥当性が確かめられている。

第4章では、第2章および第3章で測定された溶鉄中テルルの熱力学的データを用いて、溶鋼中へのテルル添加によるMnS系介在物の形態制御のメカニズムに関する検討が行われている。溶鉄中テルルの熱力学的データに加えて必要となるMnS-MnTe-FeS-FeTe系融体の熱力学的データは、CALPHAD法により既存の実験状態図を新たに解析することにより得られている。Scheil-Gulliverの式に基づく凝固計算により、溶鋼へのテルルの添加により共晶MnSの析出量が減少することが示され、これが従来の研究で報告されているテルル

の添加による介在物のアスペクト比の低下に繋がるということが示唆された。よってテルル添加鋼の組成設計の指針として共晶  $\text{MnS}$  を析出させないことが重要であることが示唆された。

第5章では、第2章および第3章で用いられた手法を発展させ、溶鉄中マグネシウムの熱力学的性質の測定が行われている。1823 Kにおけるマグネシウムガスの溶鉄中への溶解反応の標準ギブズエネルギーが決定され、溶鉄中におけるマグネシウムが従来の報告より熱力学的に安定であり、またより強力な脱酸元素であることが示唆された。

第6章では、熱力学的摂動論を用いた溶鉄中微量遷移金属元素の熱力学的性質の理論計算について論じられている。計算手法には先行研究に比べ発展的な理論が採用され、また幅広い合金系について系統的に研究が行われている。さらに、先行研究では取り扱われていない、無限希薄溶液における活量係数および相互作用パラメータの計算が行われている。純金属や溶融合金の構造について計算値は実験値との良い一致を示しており、本論文で採用された計算手法の妥当性が確認できる。活量係数および相互作用パラメータについては有限濃度の結果とよく対応する結果が得られており、無限希薄溶液の取り扱いが適切に行われていることが確認できる。活量係数および相互作用パラメータの実験値と計算値の一致は定性的なものに留まっており、課題は残されているが、系統的に計算手法の改良を行うための指針が示されており、本論文においてそのための技術的基礎が確立できたことの意義は大きいと評価できる。

第7章では、第6章までの内容を総括している。

以上のように、本論文では実測が困難な溶鉄中における揮発性元素の熱力学的性質を測定するための新たな手法が確立され、同手法は当該分野における熱力学的基礎データの拡充に貢献するものと期待される。さらに、溶鉄中微量元素の熱力学的性質の予測手法として熱力学的摂動論を用いた理論計算が初めて適用され、その実現の可能性を示すことで、マテリアル工学分野における新しい方法論が提案された。

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。