

6章 結論

本論文では、マルチスケール解析による不均一物質の評価法と応用に関する研究として、均質化法及び重合メッシュ法を用いて微視構造を考慮し、水素吸蔵合金に対しては伝熱特性や劣化機構の解明、コークスに対しては破壊機構及び強度発現機構の解明を行った。

第1章においては、研究の背景、目的及びマルチスケール解析の意義を示し、本研究に関係する既往の研究について述べた。

第2章においては、水素吸蔵合金の熱伝導解析に関して、新しいマルチスケール解析モデルである均質化法を導入した。水素吸蔵合金に特徴的な吸放出過程の微粉化や接触率の変化などの複雑な現象を考慮して解析を行い、幅広い圧力における各因子の影響の検討やそのパラメータの値が予測可能となった。

さらに、幅広い圧力やガス種に対して、3領域（連続、Smoluchowski、自由分子）を表現し、実験値との比較から、本解析による合金充填層内熱伝導解析の有効性を示した。また、実際の操作条件(高温、高圧下)では水素組成の変化により膨張挙動を考慮する必要はないことを明らかにした。

第3章においては、均質化法から得られた拡散係数から水素吸蔵合金の吸放出メカニズムを検討した。吸収反応において、粒子表面における β 相の層形成が律速段階に大きな影響を与えることを示した。つまり、 β 相の核生成数が多いほど層形成が速く進行し、 α - β 界面の水素移動が少ない場合、吸収反応が阻害されることを示した。従って、核生成数を抑制することが、反応促進のために重要である。

放出反応に関して、実験値との比較から α - β 界面の水素移動が少ないことを示した。さらに、 α 相の核生成数の比較から、粒子表面に α 相が析出しやすいほど拡散係数に有利であることを示した。しかし、実験値との比較から、放出の最終段階まで α 相が析出しない放出メカニズムであると予測した。

劣化反応に関して、酸化被膜が均質化拡散係数に及ぼす影響について検討し、酸化膜の厚みよりも粒子表面に対する被覆面積に強く影響することを示した。偏析反応に対しても、同様の解析が可能であり、表面の偏析面積の影響が大きいと予測されるが、測定データの不足から詳細な検討には至っていない。

第4章においては、重合メッシュ法を用いて、気孔、イナート、デポジットカーボン等の微視構造が亀裂に及ぼす影響を応力拡大係数から評価した。

気孔に関して、気孔率、気孔形状が応力拡大係数に及ぼす影響を検討し、気孔率と応力拡大係数の関係は式(4-19)で表され、得られた C は気孔形状によって決定され、品質評価の指標となる可能性を示した。この時、気孔の数密度は、応力拡大係数に影響しないことを示した。さらに、気孔壁からの破壊を検討し、閉気孔であれば、気孔壁からの破壊が起こりにくいことを示した。

イナートに関して、イナート面積率、イナート形状が応力拡大係数に及ぼす影響を検討した。面積率との関係は式(4-20)で表され、基質とイナートとのヤング率比やイナート形状に依存する C_i が得られる。しかし、実際のヤング率が 1.1 程度であることから、イナートが亀裂先端での応力集中に及ぼす影響は少ないことを明らかにした。また、イナートの数密度が応力拡大係数に及ぼす影響は少ないことを示した。さらに、イナートと基質の剥離現象についても検討し、その接着の度合いを損傷パラメータによって表現し、その剥離現象が亀裂の応力集中に及ぼす影響を検討することができた。

気孔及びイナートが混在した場合において応力拡大係数を評価する時、式(4-19), (4-20)を考慮した式(4-21)を用いることが有効である。

デポジットカーボンが応力拡大係数に及ぼす影響を検討し、デポジットカーボンの付着により、亀裂での応力集中を促進することを示した。

第5章においては、コークスの微視構造を評価し、破壊メカニズムを解明する目的として、均質化法が提案された。

まず、モデルケースとして、応力の集中効果及び緩和効果を引き起こす条件を検討し、微視破壊に関して、気孔及び亀裂の両方の位置関係が重要な因子であることを示した。さらに、詳細に亀裂同士の位置関係に注目し、亀裂の長さ、水平及び垂直方向の位置関係と応力集中、緩和効果の関係を明らかにした。

次に、コークスの複雑な微視構造を、デジタルイメージを用いて正確に評価し、カーボンデポジットコークスが高強度になるメカニズムを、微視応力分布及び均質化弾性係数の両方から明らかにした。オリジナルコークスでは小さな気孔に応力が分散される。しかし、弾性係数の減少による全歪みの増大により、小さな気孔の周囲で微視破壊に至る応力が発生する。一方、カーボンデポジットコークスでは、大きな気孔の間に応力が集中するものの、弾性係数の増加のために全体の歪みが小さくなり、応力は引張強度より小さく微視破壊に至らないことを示した。よって、コークスのような複雑な材料の解析には、弾性係数及び微視応力分布の両方で解析できる均質化法が大変有効である。