

Materia Japan

- ミニ特集「計算科学を用いたマグネシウムの合金設計・変形・組織形成研究の最前線」
- 入門講座 RIETAN-FPなどを徹底活用した粉末構造解析—3. 構造モデル構築と電子・散乱長密度の可視化—

まてりあ

Vol.56 MTERE2 56 (8) 479~532 (2017)

2017 **8**

FRITSCH “NANO領域”

遊星型ボールミル “PREMIUM LINE” モデル P-7 **新型**



容器がセットされる様子。

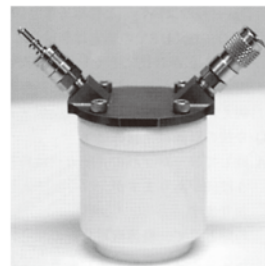
特色

1. 従来弊社P-7と比べて250%の粉碎エネルギーUP。
自転公転比：1：-2. Max 1,100/2200rpm
粉碎エネルギー：Max 94G(現状P-7：46.08G)
2. 容器は本体内に。
外部に飛び出す危険は無し。
3. 搭載容器も20, 45, 80ml
の3種類。
材質は従来どおり多様。
雰囲気制御容器も
各種用意。



従来型ボールミル “CLASSIC LINE”

premium lineと並んで従来どおりの
遊星型ボールミルトリオも併せて
ご提供いたします。



フリッチュ社が開発した
遊星型シリーズの
バイオニア機種。



▲P-5/4

世界で初めて容器ひとつで
遊星運動に成功した
昨年度のベストセラー機種



▲P-6

少量試料を対象にした
パワフルな機種



▲P-7

全機種共通の特長

- 雰囲気制御容器以外の通常容器、ボールの材質は、ステンレス、クローム、タンガステンカーバイド、メノー、アルミナ、ジルコニア、窒素ケイ素、プラスチックポリアミドの8種類。
- 乾式、湿式の両粉碎も可能。
- ISO9001、CE、TÜVの国際安全基準をクリアー

フリッチュジャパン株式会社

本社 〒231-0023 横浜市中区山下町252
大阪営業所 〒532-0011 大阪市淀川区西中島7-12-5

info@fritsch.co.jp <http://www.fritsch.co.jp>

Tel (045)641-8550 Fax (045)641-8364
Tel (06)6390-0520 Fax (06)6390-0521

8

2017
Vol.56
No.8

まてりあ

◎ 会告原稿締切：毎月1日



翌月号(1日発行)掲載です。

- 支部行事：shibu@jim.or.jp
- 本会記事：stevent@jim.or.jp
- 掲 示 板：materia@jim.or.jp

ミニ特集「計算科学を用いたマグネシウムの合金設計・変形・組織形成研究の最前線」

企画にあたって 染川英俊 池田賢一	479
第一原理計算によるマグネシウム合金のすべり変形挙動評価 山口正剛	480
マグネシウムを対象とした結晶塑性解析 眞山 剛	484
分子動力学法を用いたマグネシウム合金の双晶と転位の相互作用の解析 湯浅元仁 千野靖正 馬淵 守 宮本博之	488
マグネシウムの破壊挙動に関する分子動力学解析 松中大介 渋谷陽二	493
フェーズフィールド法による LPSO 相晶出の駆動力計算 大出真知子	498

入門講座	RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析 —3. 構造モデルの導出と電子・散乱長密度の三次元可視化— 泉 富士夫	503
粉末回折データから未知構造のモデルを構築し、電子や原子核の空間分布を視覚化する技術を紹介。		

新進気鋭	高活性な白金ナノ粒子触媒の開発と電極触媒としての応用展開 白仁田沙代子	508
------	-------------------------------------	-----

はばたく	博士として生きること 峯田才寛	512
------	-----------------	-----

本会記事	会告	513	書評	524
	掲示板	521	新入会員	525
	会誌・欧文誌 8号目次	523	行事カレンダー	527
	次号予告	524	訂正	531

会誌・欧文誌・まてりあの投稿規定・投稿の手引・執筆要領、入会申込書、刊行案内はホームページをご参照下さい。
<http://jim.or.jp/>

表紙デザイン：北野 玲
複写をご希望の方へ

本会は、本誌掲載著作物の複写に関する権利を一般社団法人学術著作権協会に委託しております。本誌に掲載された著作物の複写をご希望の方は、(一社)学術著作権協会より許諾を受けて下さい。但し、企業等法人による社内利用目的の複写については、当該企業等法人が社団法人日本複写権センター((一社)学術著作権協会が社内利用目的の複写に関する権利を再委託している団体)と包括複写許諾契約を締結している場合にあつては、その必要はありません。(社外頒布目的の複写については、許諾が必要です。)

権利委託先 一般社団法人学術著作権協会
〒107-0052 東京都港区赤坂 9-6-41 乃木坂ビル 3F
FAX 03-3475-5619 E-mail: info@jaacc.jp <http://www.jaacc.jp/>
複写以外の許諾(著作物の引用、転載、翻訳等)に関しては、直接本会へご連絡下さい。

TEST2017 JAPAN TESTING TECHNOLOGY SHOW 2017

第14回総合試験機器展

2017年9月13日(水)～15日(金) 東京ビッグサイト 東ホール



<http://www.jtma.jp>

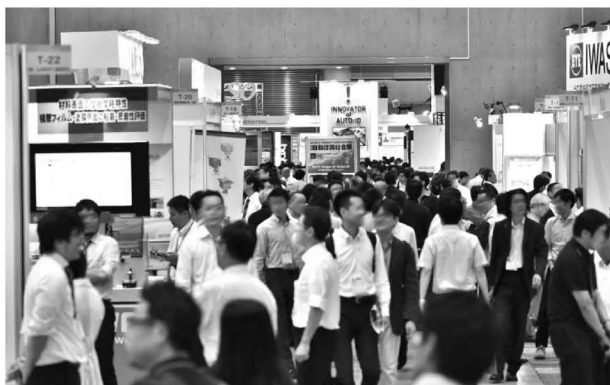
【開催概要】

名称: TEST2017 [第14回総合試験機器展]
 テーマ: 未来につなぐ試験と計測 “見せる信頼—確かな品質”
 会期: 2017年9月13日(水)～15日(金) 3日間
 開催時間: 10:00～17:00
 会場: 東京ビッグサイト 東ホール
 主催: 日本試験機工業会
 後援: 経済産業省(申請中)
 特別協力: フジサンケイ ビジネスアイ
 協賛: 独立行政法人製品評価技術基盤機構(NITE)、
 公益財団法人日本適合性認定協会(JAB)、
 一般財団法人日本品質保証機構(JQA)、
 日本材料試験技術協会、
 日本電気計器検定所(JEMIC)

展示会事務局: (株)シー・エヌ・ティ

【出展内容】

- ◇材料試験機
- ◇構造物試験機
- ◇動力・釣合い試験機
- ◇環境試験装置
- ◇振動・衝撃試験機
- ◇非破壊検査・試験機
- ◇画像入力/画像処理/画像解析/3次元計測
- ◇受託試験・委託試験・レンタル・校正業務
- ◇計測評価・その他試験機
- ◇試験解析ソフト(DIC技術など)/試験分析/HILS



開催記念セミナー【聴講無料、事前予約制(8月上旬～公式サイトにて)】

9月13日(水)	基礎セミナー K1 10:15～11:00 「硬さ試験」の基礎 日本試験機工業会 材料試験技術委員会 硬さ試験分科会
	基礎セミナー K2 11:45～12:30 「金属シャルピー衝撃試験」の基礎講座 日本試験機工業会 材料試験技術委員会 疲れ・靱性試験分科会
	基礎セミナー K3 13:45～14:30 衝撃・落下試験の基礎 日本試験機工業会 環境装置技術委員会 機械環境分科会
9月14日(木)	専門セミナー S1 15:00～16:10 金属材料の試験方法の国際標準化の活動状況(仮) 元 ISO/TC 164/SC 1(一軸試験), SC 4/WG 2(衝撃試験) (活用事例紹介)破壊靱性に関連したISO規格に対する最近の日本の取り組み ISO/TC 164/SC 4/WG 3(破壊試験)
	基礎セミナー K4 10:15～11:00 「引張り・圧縮試験」の基礎から最新の試験例を紹介 日本試験機工業会 材料試験技術委員会 静的強度試験分科会
	基礎セミナー K5 11:45～12:30 「耐候性試験」の基礎と各種試験装置 日本試験機工業会 環境装置技術委員会 耐候性分科会
9月15日(金)	基礎セミナー K6 13:45～14:30 「腐食試験」の基礎と国内外の規格 日本試験機工業会 環境装置技術委員会 腐食環境分科会
	専門セミナー S2 15:15～16:00 電気自動車(EV)、ハイブリッド自動車(HEV)用コンポーネント部品の耐環境試験法の国際標準化活動 公益社団法人自動車技術会 高電圧部品耐環境試験法分科会
	基礎セミナー K7 10:15～11:00 「疲労試験」の基礎講座 日本試験機工業会 材料試験技術委員会 疲れ・靱性試験分科会
9月15日(金)	基礎セミナー K8 11:45～12:30 「環境試験」の基礎講座 日本試験機工業会 環境装置技術委員会 気象環境分科会
	基礎セミナー K9 13:45～14:30 複合環境試験(温度・湿度-振動)の動向 日本試験機工業会 環境装置技術委員会 機械環境分科会

【展示会に関する問い合わせ先】

(株)シー・エヌ・ティ 担当: 岩崎・吉田
 Tel. 03-5297-8855 Fax. 03-5294-0909
 E-mail: test2017@cnt-inc.co.jp



Your partner
for materialography

Made in Germany



自動研磨機 SCANDIMATIC 33305

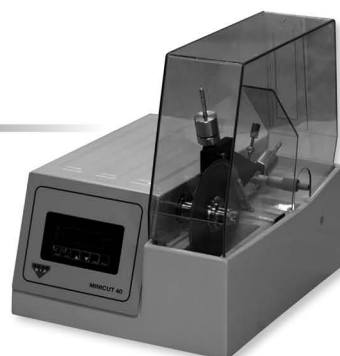
ヨーロッパ伝統の重錘を使った昔ながらのシンプルにして堅牢な研磨機。必要最低限の機能のみを搭載。それが経済的な価格を生み出しました。



- φ200mmの研磨盤対応
- 重錘はφ25mm、φ30mmの試料で3個、φ38mmの試料には2個一度に研磨可能
- 研磨盤回転数は40~600rpm、1rpm毎に設定可能
- 本体、PVC製研磨盤、パフを含めて定価100万円(税別)

精密切断機 MINICUT 4000

- 低速で試料にストレスを与えず
- 50~1,000rpmの広い範囲での設定可能
- 切断位置はマイクロメーターで±0.01mmで設定可能
- ダイヤモンド、CBN、SIC製の切断刃を用意



試料埋め込み材料、アクセサリ



SCANDIA社の消耗品は極めて高い評価をいただいております。その代表作がSCANDIQUICKです。

- 試料への密着性が高い常温硬化剤。硬化時間はわずか5分
 - 構成は粉末硬化剤と液体硬化剤。これを10:6の比率で混合
- その他各種有効な消耗品を用意してございます。

フリッチュジャパン株式会社

本社 〒231-0023 横浜市中区山下町252
大阪営業所 〒532-0011 大阪市淀川区西中島7-12-5

info@fritsch.co.jp <http://www.fritsch.co.jp>

Tel (045)641-8550 Fax (045)641-8364
Tel (06)6390-0520 Fax (06)6390-0521

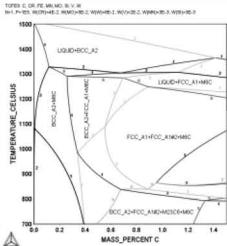
統合型熱力学計算ソフトウェア

Thermo-Calc Software

Thermo-Calcは、熱力学平衡計算および状態図作成ツールです。鉄鋼材料・軽金属を中心に多数の研究機関や大学・民間企業で利用され、事実上の標準ソフトウェアとなっております。

Thermo-Calc

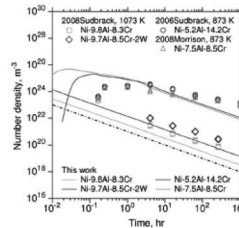
析出モジュール TC-PRISMA



多元系状態図の作成や合金・化合物、溶体相の熱力学量の計算。
(左図) 高速度鋼の状態図
組成: Fe-4Cr-5Mo-8W-2V-0.3Mn-0.3Si-xC(wt%) x=0~15

Thermo-Calc 詳細

検索



核生成、成長や結晶粒粗大化を計算。

(左図) Ni基超合金の各温度における γ' の析出計算

TC-PRISMA 詳細

検索

☆ 定期トレーニングのご案内 ☆

材料設計シミュレーション体験セミナー(無償)

2017年10月12日(木) 13:00~17:00

Thermo-Calc グラフィカルモードトレーニング(有償)

2017年9月5日(火)10:00~17:00

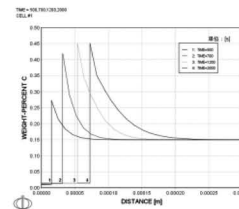
DICTRA トレーニング(有償)

2017年9月6日(水)10:00~17:00

詳細・お申込みはこちらから

<http://www.engineering-eye.com/seminar/thermocalc.html>

拡散モジュール DICTRA



多成分系の拡散方程式を解き、拡散律速型変態を計算。

(左図) Fe-Cにおける $\gamma \rightarrow \alpha$ 相変態

DICTRA 詳細

検索

合金組織形成シミュレーションソフトウェア



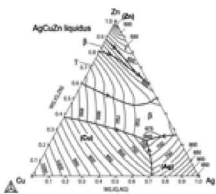
MICRESS

MICRESS 詳細

検索

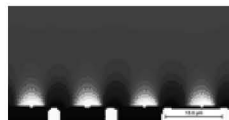
マルチフェーズフィールド法による合金組織形成計算ソフトウェアです。Thermo-Calcの熱力学データベースと連携して実用合金の凝固や固相変態のミクロスケールの組織変化を予測します。

thermodynamics



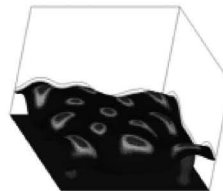
Potential and diffusivity

mass transfer



diffusion equation

interfaces



phase field method



オプション

溶湯流れの影響を受ける凝固や応力・歪みの影響を受ける変態の組織を予測が可能

MICRESSの特徴

- ◆ 任意数の成分、相および粒で構成された系
- ◆ 多様な核生成設定機能
- ◆ 異方性界面
(ファセット界面にも対応)
- ◆ 定比化合物物相の取り扱いの精度と安定性の向上



Challenging Tomorrow's Changes

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社
〒100-6080 東京都千代田区霞が関3-2-5霞が関ビル
URL:<http://www.engineering-eye.com/>

科学システム本部 CAEソリューション営業部
Tel:03-6203-7344 Fax:03-3539-5173
E-mail:thermo-calc@ctc-g.co.jp

企画にあたって

染川 英俊* 池田 賢一**

マグネシウムは、地中埋蔵量が豊富で、実用金属の中で最軽量であるため、次世代の軽金属材料として注目を浴びている。本会第2分科のテーマでもある「エコマテリアル」分野に対しても、輸送機器をはじめとする部材軽量化効果が高いなど、その役割は極めて大きい。

マグネシウムおよびマグネシウム合金に関する研究は、世界的に盛んであり、図1に示すように、関連学術論文の掲載数は年々増加傾向にある。例えば、昨年の論文数は2000年と比較して7倍以上である。本誌においても、2015年にミニ特集号として「シンクロ型LPSO構造の材料科学」が発刊され⁽¹⁾、本会欧文誌でも、マグネシウムに関する特集号が企画され、2001年から「高性能マグネシウムの新展開」が6度にわたり、また、2013年と2015年には「長周期積層構造とその関連材料」が刊行されている⁽²⁾⁽³⁾。2000年頃の研究報告例は、強度、延性、クリープなど、鋳造材や展伸材の機械的性質が主流であった。最近では、素材の安全性・信頼性に関する力学特性は勿論のこと、溶接・接合技術や二次成形(加工)性の改善、生体適合の評価や、新規機能性の探索など、その研究内容は、基礎から応用まで多岐にわたっている。

一方で、六方晶金属からなるマグネシウムの室温塑性変形機構は、転位のすべり変形のみでは von Mises の条件を満足しないことから、双晶変形が関与し、立方晶系金属とは異なる力学挙動を示すことが知られている⁽⁴⁾。昨今の飛躍的な計算機性能の向上によって、実験科学与計算科学を融合させた材料開発や基礎現象の究明が進められている。マグネシウムについても、結晶構造に起因した特異な力学挙動の解明に注目した研究が実施され、その論文掲載数は増加傾向にある(図1参照)。しかし、計算科学の分野においても六方晶金属の変形挙動を議論するためには、立方晶系金属で構築された評価手法が適用できない場合があることから、様々な検討や取り組みがなされ、報告されている。

そこで、今回のミニ特集では、マグネシウム計算科学の最近の話題でもある転位すべりなどの塑性変形機構、き裂進展問題、集合組織や第二相の組織形成に関する現象・諸特性について、第一原理計算、分子動力学、結晶塑性、フェーズフィールド法のように評価スケールの異なる計算科学的アプローチによって得られた成果について解説いただいた。本会会員の知識や理解を深めていただくことはもとより、これから金属材料研究に取り組もうとしている次代を担う若手技術者

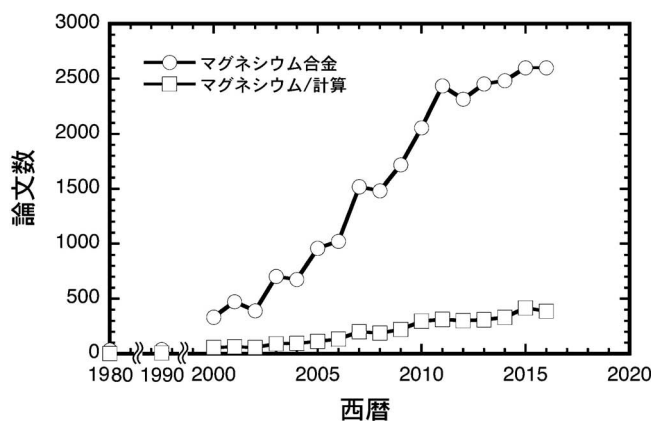


図1 Web of Scienceに掲載されている年度毎の論文数。

や研究者の契機になれば、望外の喜びである。末筆ながら、多忙にもかかわらず、本特集の趣旨に賛同し、執筆に快諾いただいた先生方に重ねて感謝申し上げる。

文 献

- (1) 例えば古原 忠：まてりあ, **54**(2015), 43.
- (2) Y. Kojima: Mater. Trans. JIM, **42**(2001), 1154-1159.
- (3) T. Furuhashi et al.: Mater. Trans., **54**(2013), 631.
- (4) 吉永日出男：稠密六方晶金属の変形双晶, 内田老鶴圃, (2007).

★★
染川英俊

2004年 大阪府立大学大学院工学研究科博士後期課程 修了
同年 独立行政法人物質・材料研究機構 入所
2011年4月- 同志社大学理工学部 客員教授
2016年12月- 現職

専門分野：破壊、材料プロセス、高温変形
◎マグネシウムをはじめとする軽金属材料の高性能化に関する研究に従事。

★★



染川 英俊



池田 賢一

* 国立研究開発法人物質・材料研究機構 構造材料研究拠点・グループリーダー(〒305-0047 つくば市千現 1-2-1)

** 北海道大学大学院工学研究科 材料科学部門・准教授(〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目)

Preface for Special Issue on Recent Advances in Numerical Studies for Magnesium Design, Deformation and Microstructural Evolution~; Hidetoshi Somekawa* and Ken-ichi Ikeda**(*Research Center for Structural Materials, National Institute for Materials Science, Tsukuba. **Division of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo)

Keywords: *magnesium, first-principles calculations, molecular dynamics, crystal plasticity, phase field model*

2017年6月29日受理[doi:10.2320/materia.56.479]

第一原理計算によるマグネシウム合金の すべり変形挙動評価

山口 正 剛*

1. 緒 言

従来の金属材料の中でマグネシウム(Mg)合金は最も軽量であるため、自動車や鉄道車両、航空機の部材を Mg 合金で置き換えることができれば、燃費を改善する上で効果的である。しかし六方晶金属の特色として、結晶の底面と非底面の間で臨界分解せん断強さ(CRSS=Critical Resolved Shear Strength)に大きな差があるため、低温および室温での成形性が悪い⁽¹⁾⁻⁽³⁾という問題がある。

成形性を向上させるためのよく知られている方法の1つは、集合組織制御(texture control)すなわち底面の分布状態を制御することである。もう1つの方法は非底面転位すべりを活性化させるために、合金元素として他の元素を微量添加することである。希土類(RE=Rare Earth)元素の添加は成形性の改善だけでなく、鍛造や押出など展伸加工に必要な温度の低下をもたらす。例えば Mg-RE 系合金は大きな延性を示し⁽⁴⁾⁻⁽¹²⁾、Mg-Ce 合金は冷間圧延を行ってもクラックなどの欠陥が導入されないことが知られている⁽¹³⁾。これらの特性は微細組織観察によると、非底面転位すべりの活性化に関連していると報告されている⁽⁴⁾⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁶⁾。第一原理計算による最近の研究では、RE 元素を添加すると非底面の CRSS が減少し、非底面転位すべりが促進されることが指摘されている⁽⁴⁾⁽¹⁷⁾⁻⁽²⁰⁾。K, Na, Ca, Zr などの他の元素も、RE 元素と同じ役割を果たす可能性が示されている⁽¹⁸⁾。

最近筆者らは計算科学と実験の協調により、Mg 合金の変形挙動に及ぼす合金元素の影響について系統的な調査を行った⁽²¹⁾。第一原理計算により非底面すべりの一つである柱面すべりの CRSS を低減する合金元素を検討した後、実験的にこれらの合金元素の添加による変形能および微細組織変化への影響を調べた。本稿では、その計算部分についての概要を紹介する。

2. 計 算 方 法

Hcp Mg 結晶中の非底面の一つである柱面に対し、原子面を2次元的にすべらせたときのエネルギー変化すなわち一般化積層欠陥(GSF=Generalized Stacking Fault)エネルギーに対する元素添加の影響を、Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)⁽²²⁾⁽²³⁾を用いて第一原理から計算した。Perdew, Burke, Ernzerhof⁽²⁴⁾の一般化勾配近似を用いたProjector-Augmented Wave (PAW)法⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾を用いた。Methfessel-Paxton スメアリング法の幅は0.2 eV、平面波基底関数のカットオフエネルギーは350 eVとした。Gd, Ce および Mn 元素を含む系については、強磁性配置のスピン分極計算を行った。

柱面の GSF エネルギー計算のための単位セルを図1に示す。このセルの3つの結晶学的方向および長さは、 $[11\bar{2}0]$ (0.319 nm)、 $[0001]$ (0.519 nm) および $[\bar{1}100]$ (3.813 nm) である。このセルは、18原子層からなるスラブと、 $[\bar{1}100]$ 方向に沿って約1.5 nmの幅を有する真空領域を含む。柱面の原子層には、0.092 nm と 0.184 nm の2つの間隔幅があるが、GSF 計算のためのすべり面は、図1に示すようにスラブの中心付近の広い方の原子面間隔の領域内に設定した。k 点メッシュには、 $13 \times 8 \times 1$ Monkhorst-Pack サンプリングを用いた。GSF 計算では、セルの大きさと形状は固定されており、原子位置はすべり面に平行な方向には固定するが、すべり面に垂直な方向には緩和した。

図1に示すように、GSF エネルギーとそこから導かれるパイエルス応力(σ_p)に対する Y 添加の影響は、柱面のすべり面に隣接する Mg 原子層の原子1つを Y 原子で置換することによって調べることができる。GSF エネルギーに対する Y 添加効果の濃度依存性を評価するため、柱面に沿った単位セルのサイズとして $[11\bar{2}0]/3$ および $[0001]$ 軸ベクトルの方向について 2×1 , 2×2 , 3×3 とし、Y 原子による置換はすべり面に隣接する1つの Mg 原子に限定した。これら 2×1 , 2×2 および 3×3 セルのすべり面に隣接する1原子層内

* 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター・研究主幹(〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2-4)
First-principles Study on the Slip Behavior of Magnesium Alloys; Masatake Yamaguchi (Center for Computational Science and e-Systems, Japan Atomic Energy Agency, Tokai-mura, Ibaraki)
Keywords: *magnesium alloys, solute atom, first-principles calculations, mechanical properties, generalized stacking fault energy, prismatic slip*
2017年4月26日受理[doi:10.2320/materia.56.480]

での Y 原子の濃度は50, 25および11%となり, ここでは Y = 50%, Y = 25%, Y = 11%と示す. Mg に固溶できる他の合金元素⁽²⁷⁾の影響も, 同じモデルを使用して計算した.

計算された GSF エネルギーマップから, 絶対零度における CRSS に対応するパイエルス応力(σ_P)を理論的に推定するには, 次のようにする. Joos and Duesbery⁽²⁸⁾は, GSF エネルギーマップから σ_P を計算するための理論式を提案している. その式は, GSF エネルギーマップ上のスリップ方向の最小エネルギー経路にそって得られる最大復元力(τ_{max}), バーガースベクトルの長さ(b_v), スリップ方向に沿った層間距離 a' , およびエネルギー係数 K ⁽²⁹⁾を必要とする.

$$\sigma_P = \frac{Kb_v}{a'} \exp\left(-\frac{Kb_v}{2a'\tau_{max}}\right) \quad (1)$$

バーガースベクトルが $[11\bar{2}0]/3$ である柱面上の刃状転位については, hcp Mg の弾性定数(実験)からエネルギー係

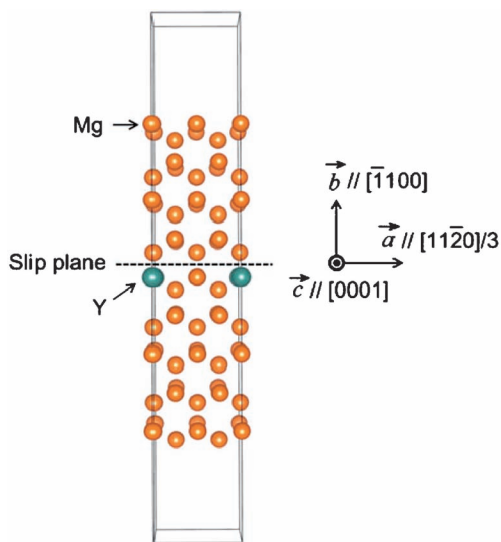


図1 Hcp Mg 柱面上の GSF エネルギーマップ計算のためのユニットセルモデリング. このセルは 2×1 セル (Y = 50%) の場合であり, hcp Mg 結晶単位格子の a および c 軸ベクトルの長さにそれぞれ 2 および 1 を掛けた長さの軸で柱面が構成されている. (文献(21)の Fig. 1 より転載)(オンラインカラー).

数 K ($= 26.4$ GPa) を計算し⁽³⁰⁾, b_v には hcp Mg の格子定数 (0.318 nm) をとった.

我々の目的は, hcp Mg の柱面すべりに対して軟化効果をもつ溶質元素の候補を迅速に見つけることである. この目的のため, 先行する文献で報告されている方法よりも上で述べた単純な方法を選択した. Yasi ら⁽¹⁸⁾は, GSF エネルギー表面上の限られた数の点上において, 溶質元素の添加によるエネルギー変化を計算し, 次いでこれらのエネルギーを彼らのモデル化のパラメータとして使用した. 一方我々は, 溶質元素を添加した完全な GSF 表面を計算し, Joos と Duesbery によって提案された式から σ_P を推定するために, 使用される最小エネルギー経路に沿った最大復元力 (τ_{max}) を計算した.

3. 合金元素選択のための材料設計

Hcp Mg 結晶中の柱面すべり面に隣接する原子層における Y 原子の存在は, a ($[11\bar{2}0]/3$) 方向のすべりに対して顕著な改善をもたらす. 図 2 に示すように, GSF エネルギーマップの全体的な傾向は, Y の置換とその濃度の増加によって大きく変化することが明らかである. 特に Y = 50% の場合, a ($[11\bar{2}0]/3$) 方向のエネルギー障壁はほとんど消失することが分かる. 対照的に, c ($[0001]$) および $a+c$ の方向のすべりは, Y の置換によって抑制される傾向にある.

a ($[11\bar{2}0]/3$) 方向の柱面すべりに対する Y の促進効果は, a ($[11\bar{2}0]/3$) 軸に沿った一次元エネルギー障壁を示す図 3 においてさらに正確に示される. Y = 50% の場合, エネルギー障壁はほとんど消える. このエネルギー障壁の微分曲線を図 4 に示す. これは復元力と呼ばれ, その最大値は最大復元力 (τ_{max}) と呼ばれる. これは, 式 (1) から得られるパイエルス応力 (σ_P) の推定に使用される. これらの結果は, すべり面に隣接する Mg 原子を Y 原子で置換することによって, a ($[11\bar{2}0]/3$) 方向の柱面すべりが強く促進されることを示している. Y 原子の添加による τ_{max} と σ_P の変化は, 以下のとおりである. (τ_{max} , σ_P) は, Y = 0% のとき (2.2 GPa, 67 MPa), Y = 11% のとき (1.7 GPa, 11 MPa), Y = 25% のとき (1.2 GPa, 0.3 MPa), Y = 50% のとき (0.2 GPa, 0.0 MPa) と

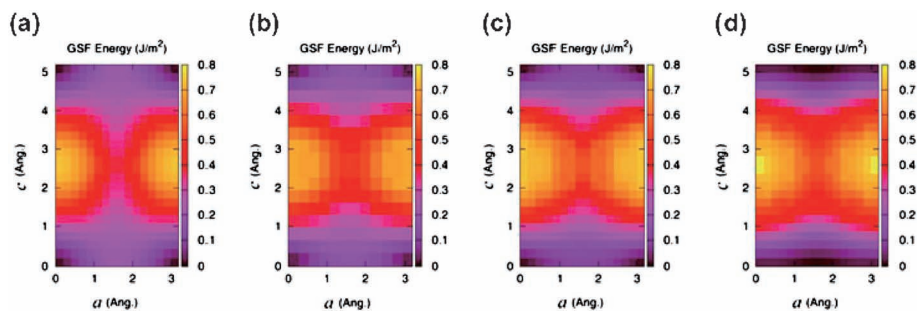


図2 (a) 純粋な Hcp Mg (Y = 0%) の場合の柱面の GSF エネルギーマップの計算結果. 柱面に隣接する原子層の Mg 原子の 1 つが (b) Y = 11%, (c) Y = 25% および (d) Y = 50% の濃度で Y 原子に置換されている. (文献(21)の Fig. 2 より転載)(オンラインカラー).

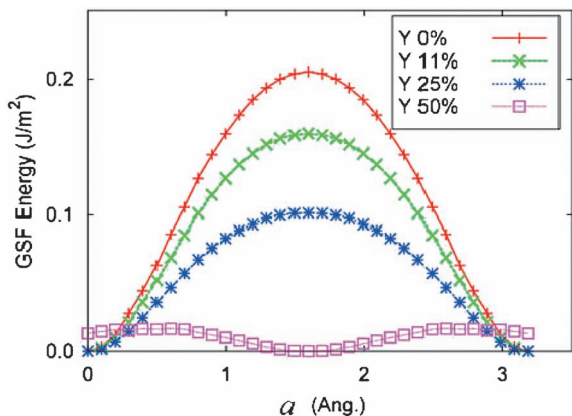


図3 Hcp Mg 柱面の図2に示す2次元GSFエネルギーマップにおける、 a 軸に沿った1次元のエネルギー障壁。(文献(21)のFig. 3より転載)(オンラインカラー)。

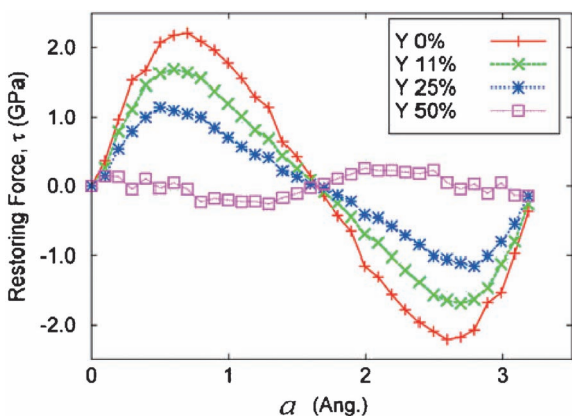


図4 1次元GSFエネルギー(図3)の微分値として計算された復元力 τ 。最大値は最大復元力 τ_{max} と呼ばれる。(文献(21)のFig. 4より転載)(オンラインカラー)。

なった。 τ_{max} の減少は、 $Y=11\%$ の場合にわずか10-15%であるが、 σ_P は60-70%減少する。これは式(1)に見られるように、 τ_{max} に対する σ_P の指数関数的な依存性に起因する。

Y元素と同様の効果を持つ他の元素を、以下のように探索した。図2, 3および4の $Y=50\%$ の場合と同様の計算を、Yを $X=Li, Ca$ などの他の元素Xで置換することによって実行した。すべり面に隣接する原子層におけるX原子の濃度は現実にはありえないほど高い(50%)ものの、それは重要な問題ではない。なぜなら我々の目的は、添加元素ごとに正確なパイエルス応力(σ_P)の値を計算することではなく、多くの溶質元素の中から柱面すべり促進効果をもつ元素を素早く見つけることだからである。これらの元素に対して計算された σ_P は図5にまとめられており、これらはPaulingの電気陰性度⁽³¹⁾およびClementiら⁽³²⁾による理論原子半径に対して整理され、プロットされている。

図5に示すように、Ca, Ce, Gd, Sc, SrおよびZrならびにYの元素は、純Mgと比較してパイエルス応力(σ_P)の著し

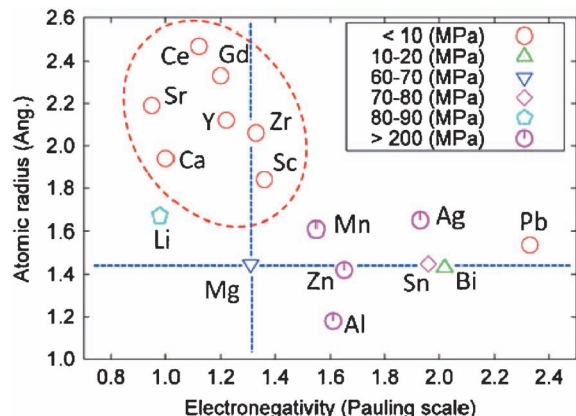


図5 各種添加元素の $X=50\%$ の場合のパイエルス応力 σ_P (MPa)の計算結果。点線はMgの原子半径と電気陰性度の位置を示す。破線で囲まれた領域中の添加元素において、柱面すべりが強く促進されることが示唆される。(文献(21)のFig. 5より転載)(オンラインカラー)。

い低下をもたらすことが見出される。これらの元素は、Mgと同様の電気陰性度を持つため周囲のMg原子と金属的な結合を形成すると考えられ、一方でMgに比べて原子半径が大きいため柱面間の層間距離を広げる傾向を持つと考えられる。これらの理由から、Ca, Ce, Gd, Sc, SrおよびZrが、我々の計算においてYの場合と同様にMg-X合金において高い変形能をもたらすと考える。後に実験的に示されたが、Zrを除いて($X=$)Ca, Ce, Gd, ScおよびSrを添加すると、Mg-Y合金の場合と同様にMg-X合金の変形能が高くなった⁽²¹⁾。

一方、図5に示すLi, Mn, Zn, Al, Sn, Bi, Ag, Pbなどの元素は、Mgに大きな変形能を生じさせない。Pbはパイエルス応力(σ_P)を低下させるが、Pbの電気陰性度はMgのそれとは大きく異なり、MgからPbへの電子移動が大きいと考えられ、金属結合よりもイオン結合が生じる可能性がある。図5で観察されたように比較的小さい σ_P を与えるBiについても、実験的には高い変形能は見られなかった⁽²¹⁾。これらの結果は、高い変形能を実現するために適切な合金元素をMgに導入するための簡単なガイドラインを提供する。つまり候補元素としては、Yと同様の電気陰性度を有し、Mgよりも大きな原子半径を有する元素ということになった。

4. 結 言

第一原理計算により特定の結晶面をすべらせたときの障壁エネルギーを計算し、それに対する添加元素の影響を調べることで、Mg合金の成形性に対する添加元素の影響を見積もった。予測した結果(パイエルス応力変化)を添加元素の原子半径と電気陰性度で整理することで、成形性を改善する元素を絞り込めることを示し、後に実験的にも確認された⁽²¹⁾。

材料の伸びを決定する物理・化学・材料力学的要因は複雑であり未解明の部分が多い。今回の計算は、その多種多様な

要因の中のごく一部しか捉えていないため、予測が成功したのは多分に偶然の賜物かもしれない。しかしながらより良い材料を見つけるためには、計算が役立つことを示唆する一例と信じたい。最後に私事で恐縮ですが、筆者は「物質設計」という言葉に惹かれて大学院から第一原理計算を始めたので、本稿の結果を大変感慨深く思っています。

本研究は、トヨタ自動車株式会社との共同研究「構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究」(H23-H27)の助成を受けて行われました。染川英俊博士、向井敏司教授、都留智仁博士、板倉充洋博士、蕪木英雄博士を始め、多くの方々からの協力と有益な助言をいただきました。ここに深く感謝申し上げます。

文 献

- (1) H. Yoshinaga and R. Horiuchi: *Trans. JIM*, **4**(1963), 1-8.
- (2) R. E. Reed-Hill and W. D. Robertson: *Acta Metal.*, **5**(1957), 717-727.
- (3) W. F. Sheely and R. R. Nash: *Trans. Metall. Soc. AIME.*, **218**(1960), 416-423.
- (4) S. Sandlobes, Z. Pei, M. Friak, J. F. Zhu, F. Wang, S. Zaefner, D. Raabe and J. Neugebauer: *Acta Mater.*, **70**(2014), 92-104.
- (5) D. H. Kang, D. W. Kim, S. Kim, G. T. Bae, K. H. Kim and N. J. Kim: *Scripta Mater.*, **61**(2009), 768-771.
- (6) H. Somekawa, Y. Osawa, A. Singh, K. Washio, A. Kato and T. Mukai: *Mater. Trans.*, **55**(2014), 182-187.
- (7) S. Sandlobes, S. Zaefner, I. Schestakow, S. Yi and R. G. Martinez: *Acta Mater.*, **59**(2011), 429-439.
- (8) N. Stanford, D. Atwell, A. Beer, C. Davies and M. R. Barnett: *Scripta Mater.*, **59**(2008), 772-775.
- (9) S. R. Agnew, M. H. Yoo and C. N. Tome: *Acta Mater.*, **49**(2001), 4277-4289.
- (10) I. J. Beyerlein and L. S. Toth: *Prog. Mater. Sci.*, **54**(2009), 427-510.
- (11) K. Hantzsche, J. Bohlen, J. Wendth, K. U. Kainer, S. B. Yi and D. Letzing: *Scripta Mater.*, **63**(2010), 725-730.
- (12) J. Hirsch and T. Al-Samman: *Acta Mater.*, **61**(2013), 818-843.
- (13) S. L. Couling, J. F. Pashak and L. Sturkey: *Trans. ASM*, **51**(1959), 94-107.
- (14) Y. Chino, K. Kimura and M. Mabuchi: *Mater. Sci. Eng. A*, **486**(2008), 481-488.
- (15) S. Sandlobes, M. Friak, S. Zaefner, A. Dick, S. Yi, D. Letzing, Z. Pei, J. F. Zhu, J. Neugebauer and D. Raabe: *Acta Mater.*, **60**(2012), 3011-3021.
- (16) J. Bohlen, M. R. Nurnberg, J. W. Senn, D. Letzing and S. R. Agnew: *Acta Mater.*, **55**(2007), 2101-2112.
- (17) T. Tsuru, Y. Udagawa, M. Yamaguchi, M. Itakura, H. Kaburaki and Y. Kaji: *J. Phys. Cond. Mater.*, **25**(2013), 022202.
- (18) J. A. Yasi, L. G. Hector Jr. and D. R. Trinkler: *Acta Mater.*, **60**(2012), 2350-2358.
- (19) M. Muzyk, Z. Pakiel and K. J. Kurzydowski: *Scripta Mater.*, **66**(2012), 219-222.
- (20) L. Wen, P. Chen, Z. F. Tong, B. Y. Tang, L. M. Peng and W. J. Ding: *Eur. Phys. J. B*, **72**(2009), 397-403.
- (21) H. Somekawa, M. Yamaguchi, Y. Osawa, A. Singh, M. Itakura, T. Tsuru and T. Mukai: *Philos. Mag.*, **95**(2015), 869-885.
- (22) G. Kresse and J. Hafner: *Phys. Rev. B*, **47**(1993), 558-561.
- (23) G. Kresse and J. Furthmuller: *Phys. Rev. B*, **54**(1996), 11169-11186.
- (24) J. P. Perdew, K. Burke and M. P. Ernzerhof: *Phys. Rev. Lett.*, **77**(1996), 3865-3868.
- (25) G. Kresse and D. Joubert: *Phys. Rev. B*, **59**(1999), 1758-1775.
- (26) P. E. Bloechel: *Phys. Rev. B*, **50**(1994), 17953-17979.
- (27) T. B. Massalski, *Binary Alloy Phase Diagrams*, 2nd ed., ASM International Materials Park, OH, (1990).
- (28) B. Joos and M. S. Duesbery: *Phys. Rev. Lett.*, **78**(1997), 266-269.
- (29) A. J. E. Foreman: *Acta Metall.*, **3**(1955), 322-330.
- (30) S. Eros and C. S. Smith: *Acta Metall.*, **9**(1961), 14-22.
- (31) L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*, 3rd ed., Cornell University Press, Ithaca, NY, (1960).
- (32) E. Clementi, D. L. Raimondi and W. P. J. Reinhardt: *J. Chem. Phys.*, **47**(1967), 1300-1307.



山口正剛

★★
 1994年3月 東京大学大学院理学系研究科博士課程修了
 1994年4月 特殊法人日本原子力研究所 入所
 2001年10月 米国ノースウェスタン大学 客員研究員 (1年間)
 2016年4月 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 一現職
 専門分野：固体電子論(第一原理計算)、計算材料科学
 ◎金属材料の劣化メカニズム研究(粒界脆化、水素脆化等)に従事。
 ★★★

マグネシウムを対象とした 結晶塑性解析

眞山 剛*

1. はじめに

ここで紹介する結晶塑性解析で用いられている基本的な概念は、転位論や連続体力学の発展に伴い構築されており、特に集合組織の発達予測に古くから用いられてきた⁽¹⁾⁽²⁾。一方で最近、様々な金属材料を対象として結晶塑性有限要素法を用いた研究報告が増加している⁽³⁾。この理由としては、まず計算機能力の著しい向上により、汎用的な解析が可能な結晶塑性有限要素法を多結晶規模の問題に適用できるようになってきたことが挙げられる。また、結晶方位分布やひずみ分布等を実験的に精度良く計測する技術が発達し、実験観察と数値解析を定量的に比較できるようになってきたことも大きな要因であると考えられる。

純マグネシウムやマグネシウム合金(以下では両者を含めてマグネシウムと呼ぶことにする)を対象とした結晶塑性解析は、2000年頃から活発化して現在に至っている⁽⁴⁾⁻⁽⁷⁾。本稿では結晶塑性解析の基本的な考え方とマグネシウムへの適用方法について紹介した後、具体的な解析例として押出集合組織を持つマグネシウムの単軸変形と双結晶の結晶粒界近傍における不均一変形について示す。

2. 結晶塑性解析手法

本章では、現在多くの研究で用いられている Peirce らの提案したひずみ速度依存型モデル⁽⁸⁾に基づき単結晶塑性構成式の基本的な概念を説明した後、多結晶をモデル化する幾つかの方法、およびマグネシウムに適用する際に考慮すべきことについて紹介する。大変形を含めた構成式の詳細や数値積分法等は日本語の解説⁽⁹⁾を参照して頂きたい。

(1) 単結晶塑性構成式

結晶塑性構成式において、巨視的塑性変形と微視的変形機構(すべり系、双晶系等)の活動は次式で関係付けられる。

$$\mathbf{L}^p = \sum_i \dot{\gamma}^{(i)} (\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}) \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{L}^p と $\dot{\gamma}^{(i)}$ はそれぞれ塑性速度勾配テンソル⁽¹⁰⁾と変形機構*i*が活動により生じるせん断ひずみ速度を表す。また $\mathbf{s}^{(i)}$ および $\mathbf{m}^{(i)}$ は、それぞれ変形機構*i*のせん断方向の単位ベクトルおよびせん断面法線方向の単位ベクトルを示し、 $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ は $\mathbf{s}^{(i)}$ と $\mathbf{m}^{(i)}$ のテンソル積⁽¹⁰⁾を表す。したがって式(1)は、塑性速度勾配テンソル \mathbf{L}^p が、せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ と $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ の積を活動変形機構全てについて和をとることで得られることを表している。この塑性速度勾配テンソル \mathbf{L}^p の対称および反対称成分⁽¹⁰⁾は、それぞれ塑性ひずみ速度と塑性スピと呼ばれ、材料の塑性変形と結晶格子の回転を表現するために用いられる。初期結晶方位が与えられれば $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ が決まることから、各変形機構のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ がわかれば塑性速度勾配テンソル \mathbf{L}^p が得られる。したがって問題はせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ をいかに見積るかということである。

単結晶を用いた実験結果からも明らかなように、せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ は応力、温度、変形履歴等に依存する。これまでに様々な関係式が提案されているが、これまでの研究で比較的良好に用いられているのは、累乗則型の次式である。

$$\dot{\gamma}^{(i)} = \dot{\gamma}_0^{(i)} \operatorname{sgn}(\tau^{(i)}) |\tau^{(i)} / g^{(i)}|^{1/m} \quad (2)$$

ここで $\tau^{(i)}$ 、 $g^{(i)}$ および m は、それぞれ分解せん断応力、参照応力およびひずみ速度依存性指数を表す。 $\dot{\gamma}_0^{(i)}$ は参照せん断ひずみ速度であり、式(2)から明らかなように、分解せん断応力が参照応力と等しい場合におけるせん断ひずみ速度を表す。ひずみ速度依存性指数がゼロの場合、参照応力 $g^{(i)}$ が臨界分解せん断応力(CRSS)を意味することになるが、ひずみ速度依存性を持つ場合でも参照応力の初期値を近似的にCRSSとみなされることも多い。また、変形機構*i*の分解せん断応力 $\tau^{(i)}$ は次式に示す応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ と $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ のスカラー積⁽¹⁰⁾より得られる。

$$\tau^{(i)} = \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}) \quad (3)$$

以上をまとめると、結晶塑性構成式では式(1)で巨視的な塑性変形と微視的変形機構のせん断ひずみ速度が関連付け

* 熊本大学大学院先端科学研究部；准教授(〒860-8555 熊本市中央区黒髪 2-39-1)
On Crystal Plasticity Analysis for Magnesium; Tsuyoshi Mayama (Materials Science and Engineering, Kumamoto University, Kumamoto)
Keywords: magnesium, crystal plasticity, twinning, deformation, texture, diffraction, heterogeneity
2017年4月20日受理[doi:10.2320/materia.56.484]

られ、式(3)で巨視的な応力と微視的変形機構の分解せん断応力とが関連付けられている。巨視的な応力と塑性変形の関係は、式(1)、(3)を介して微視的変形機構における分解せん断応力とせん断ひずみ速度の関係である式(2)により求まる、という構造である。

式(2)中の参照応力 $g^{(i)}$ の変化は材料の巨視的な加工硬化を表現するため、その発展則は重要である。1つの表現として、他の変形機構との相互作用(潜在硬化)を含めた次式がよく用いられている。

$$\dot{g}^{(i)} = \sum_j h^{(ij)} |\dot{\gamma}^{(j)}| \quad (4)$$

ここで、 $h^{(ij)}$ は変形機構 i と j の相互作用を考慮した硬化係数行列である。 $h^{(ij)}$ の具体形は現象論的に関数を仮定したものから金属物理に立脚したものまで様々な提案があり、現在でも最も重要な研究トピックスの1つである。しかしながら、著者のマグネシウムを対象とした解析の経験では、たとえ硬化則に非常に簡単なモデルを仮定した場合でも、初期方位と初期参照応力に妥当な値を設定することにより、実験で得られる挙動を表現できることも多い。このことは各変形機構の幾何学情報と参照応力とで塑性異性が表現される結晶塑性構成式の強力な点であると思う。

(2) 多結晶のモデル化

前節の単結晶塑性構成式に基づき多結晶挙動を表現する方法は、大きく平均場型手法と Full field 型手法とに分類される。前者は塑性ひずみ一定(Taylorモデル)や応力一定(Sachsモデル)等の仮定に基づき各結晶粒の挙動を別々に評価した後にそれらの平均値を多結晶の巨視的挙動とするのに対して、後者は結晶粒の形状や配置を直接表現した解析モデルに境界条件を与えて多結晶挙動を評価する。特にマグネシウムを対象とした研究でよく用いられる多結晶解析手法は、平均場手法では Self-consistent モデル⁽⁴⁾⁽⁶⁾、Full field 手法では有限要素法⁽⁵⁾や FFT⁽⁷⁾に基づくものである。ただし、対象とする問題によっては両者を組合せた手法や、より洗練された均質化手法が用いられることもある。

(3) マグネシウムへの適用

(a) マグネシウムの変形機構

結晶塑性モデルをマグネシウムに適用する場合、単結晶で活動する変形機構を導入し、その初期参照応力と硬化則を与える必要がある。マグネシウムの変形機構は底面すべり系が支配的であることは良く知られているが、非底面すべり系や双晶系の活動について完全には明らかにされていない。これはマグネシウムに限られた状況ではなく、多くの材料において活動変形機構は必ずしも自明ではない。このような場合、単結晶の実験結果が貴重な情報であることは当然であるとして、変形機構を仮定した解析自体が単結晶挙動を調べる手段となり得る。すなわち、様々な負荷履歴における多結晶の応力-ひずみ挙動や集合組織発展を実験的に評価し、それらの挙動を最も良く再現する解析結果を与える変形機構を探索す

るのである。最近では多結晶を用いたその場回折試験⁽¹¹⁾と結晶塑性解析の比較から、より直接的に活動変形機構を調べる試みも盛んである⁽¹¹⁾⁻⁽¹⁵⁾。その場回折試験と結晶塑性解析の比較は、当初 FCC 金属⁽¹²⁾⁻⁽¹⁴⁾を対象として弾塑性 Self-consistent モデルが用いられていたが、その後マグネシウムを対象とした研究も行なわれ⁽¹⁵⁾、現在では結晶塑性有限要素を用いた研究⁽¹⁶⁾も増加している。

これまでに行なわれてきたマグネシウムを対象とする数値解析では、底面すべり系、柱面すべり系、二次錐面 $\langle \mathbf{c} + \mathbf{a} \rangle$ すべり系、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶系を導入したの多いが、破壊と関連する現象の解析等では $\{10\bar{1}1\}$ 双晶系を含める場合もある⁽¹⁷⁾。

(b) 双晶変形の導入と双晶回転モデル

純マグネシウムおよび多くのマグネシウム合金では $\{10\bar{1}2\}$ 双晶が頻繁に活動し、変形挙動の異方性や集合組織変化に著しい影響を及ぼす。したがって、結晶塑性解析においても双晶変形を適切に導入する必要がある。

双晶変形はすべり変形とは異なり、せん断方向の正負が等価とならない負荷方向依存性を示すと共に、その活動に伴い局所的に大きな結晶方位変化をもたらす。多くの結晶塑性解析では双晶面と双晶によるせん断方向をすべり面とすべり方向と等価であるとし、分解せん断応力の符号により双晶変形の負荷方向依存性を表現している。このようなモデル化では結晶塑性構成式の枠組みを用いて、双晶による塑性変形への寄与をすべりと同様に取り扱うことができる。

双晶による結晶方位変化(双晶回転)については、現時点においても研究ごとに採用されているモデルが異なるが、Van Houtte⁽¹⁸⁾の提案した Predominant Twin Reorientation (PTR) 型モデルと Kalidindi⁽¹⁹⁾の提案した Multiple Twin Scheme (MTS) 型モデルに基づく双晶モデルが比較的広く用いられている。PTR 型モデルでは双晶回転が生ずるために必要な双晶系せん断ひずみの閾値を設定し、その値に達した双晶バリエーションと母相の方位関係を用いて結晶粒全体の方位を更新する。一方の MTS 型モデルでは、双晶系せん断ひずみに応じて母相と双晶の体積分率を連続的に変化させるため、各結晶粒中に複数の双晶バリエーションが存在する状況を表現できる。各手法に利点と欠点があるが、PTR 型モデルの方が計算コストは小さく、MTS 型モデルの方が実現により近い状況を表現できる、という特長を持つ。また、Proust⁽²⁰⁾の提案した双晶モデルは MTS 型モデルの拡張と解釈できるが、双晶形成による平均結晶粒径変化が加工硬化に及ぼす影響を考慮している。さらに最近では、格子欠陥スケールの物理モデルから双晶形成・成長を表現する試み⁽²¹⁾も報告されている。

3. 数値解析例

(1) 解析モデル

本章では結晶塑性有限要素法による解析例を示す。材料挙

表1 解析に用いた材料パラメータ.

	底面すべり系	柱面すべり系	二次錐面 $\langle c+a \rangle$ すべり系	$\{10\bar{1}2\}$ 双晶系
g/MPa	50	100	150	100
h/MPa	10	100	100	10

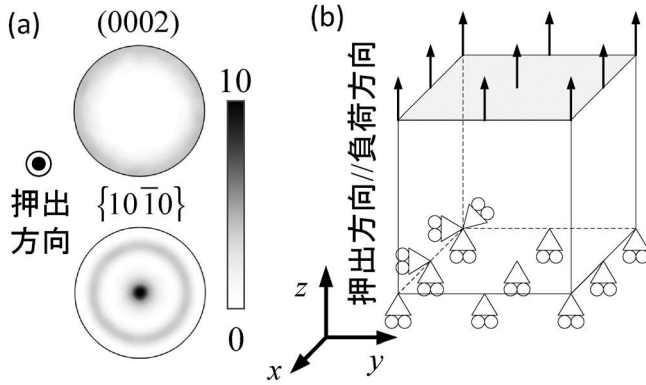


図1 解析モデル, (a)初期集合組織, (b)境界条件.

動としては線形硬化則を仮定し, MTS 型の双晶モデルを用いた. 各変形機構間の相互作用は全て等価とし, 式(4)の硬化係数行列 $h^{(ij)}$ をすべり系 i のみに依存する $h^{(i)}$ と単純化した. 変形機構および材料パラメータ(初期参照応力と硬化係数)は表1に示すとおりに仮定した. また初期集合組織として図1(a)に示すマグネシウムの典型的な押出集合組織を採用し, $20 \times 20 \times 20$ 要素で均一分割された立方体の各要素を1結晶として初期方位を割り当てた. この多結晶モデルに対して図1(b)に示すように押出軸を負荷軸とする単軸引張および単軸圧縮荷重を変位制御で与えた.

(2) 解析結果

図2(a)に解析により得られた単軸荷重挙動を示す. 実験的にもよく知られている⁽²²⁾, 引張りと圧縮の降伏および加工硬化の顕著な非対称性が表現されている. また図2(b)は10%の引張および圧縮荷重後の集合組織を示している. 引張時と比べて圧縮時には著しい集合組織変化が生じていることがわかる. これらは荷重方向依存性を持つ双晶の活動度が, 引張時と圧縮時では大きく異なるために生じた結果であり, 実験観察から得られている知見とよく対応している. なお双晶を抑制した計算を行うと, このように顕著な非対称挙動が生じないことも結晶塑性解析では確認できる.

図3は圧縮変形に伴う格子ひずみの変化を示している. 圧縮応力の上昇に伴い, 結晶面ごとに異なる格子ひずみの発達が生じている. ここで, 格子ひずみは放射光や中性子線による測定と同様に, 軸方向と半径方向に各変形機構のせん断断面法線方向が配向した結晶の寄与が平均された量であり, 実験結果と直接的な比較が可能である. 前述したとおり本研究では, 単結晶挙動を極めて単純化しているが, 過去の研究⁽²³⁾

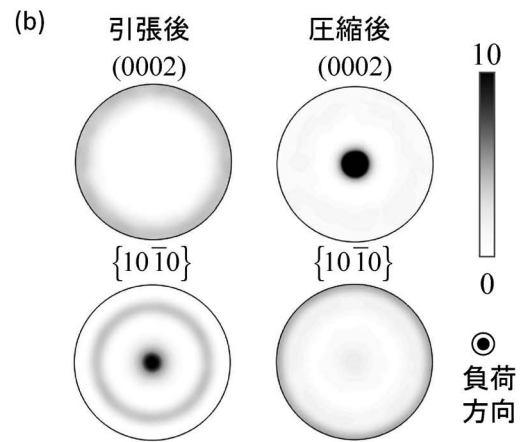
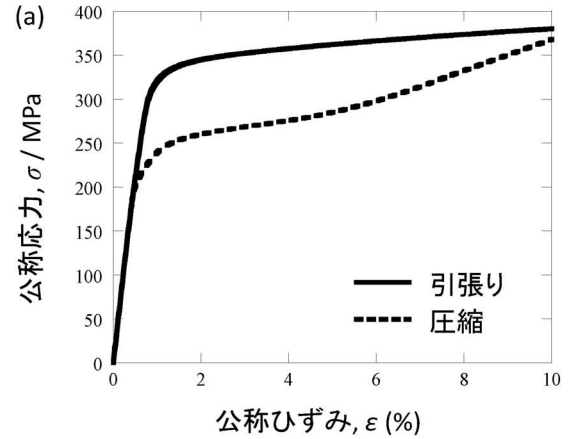


図2 押出材の非対称圧縮挙動, (a)応力-ひずみ挙動, (b)10%変形後の集合組織.

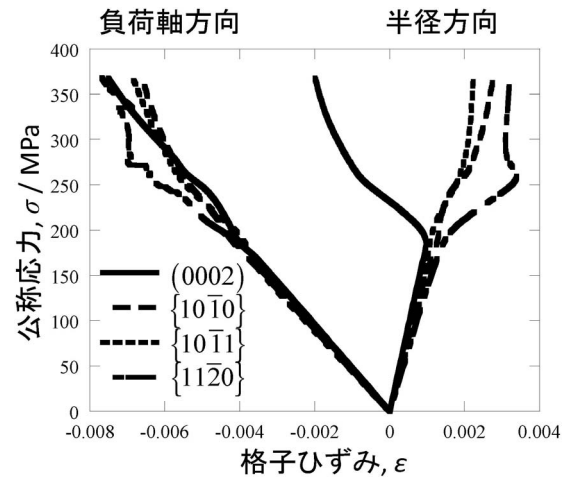


図3 圧縮荷重時の格子ひずみ発展.

で報告されている底面すべり系や双晶系の活動を示唆する格子ひずみ変化をおおむね再現している. なお前述したとおり, この格子ひずみ変化を実験と計算で同様になるようフィッティングすることにより, 各変形機構のパラメータを同定するというアプローチも可能である.

分子動力学法を用いたマグネシウム合金の 双晶と転位の相互作用の解析

湯 浅 元 仁¹⁾ 千 野 靖 正^{**}
馬 淵 守^{***} 宮 本 博 之²⁾

1. はじめに

マグネシウムは、その六方晶系の結晶構造に起因して、底面すべりの臨界分解せん断応力が、非底面すべりより小さく、室温においては1/100程度の値となることが知られている⁽¹⁾。そのため、立方晶系の鉄、アルミニウムに比べて室温におけるすべり系の数が少なく、多くのマグネシウム合金では、双晶変形が塑性変形における重要な変形機構となる。ここで形成される変形双晶、特に $\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}1 \rangle$ 双晶と $\{10\bar{1}1\}\langle 10\bar{1}2 \rangle$ 双晶は、マグネシウム合金の力学特性に大きく影響することが知られている。例えば、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶は変形初期に形成され転位の障害となり、加工硬化を引き起こすこと、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶は変形の後期に形成され、材料破壊の起点となることなどが報告されている⁽²⁾⁽³⁾。しかしながら、変形中の転位と双晶がどのように相互作用し、力学特性に影響を及ぼしているのかを明らかにすることは、実験だけでは困難である。

分子動力学法は、原子シミュレーションの一種であり、温度や外部負荷を作用させることにより、原子レベルで材料中の格子欠陥の安定性や相互作用などを解析することができる手法である⁽⁴⁾。実際にマグネシウムを含む様々な金属材料を対象に、転位と粒界や双晶との相互作用が計算されている⁽⁵⁾⁻⁽⁷⁾。

筆者らは、マグネシウムにおける双晶と転位の相互作用⁽⁸⁾⁻⁽¹⁰⁾や双晶形成⁽¹¹⁾について、分子動力学法を用いて計算を行ってきた。本稿では、マグネシウムの $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶と転位の相互作用、双晶への偏析原子がその相互作用に及ぼす影響について、原子挙動やエネルギー状態から解析した事例を紹介する。

2. 双晶と転位の相互作用の分子動力学計算

作成した $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶モデルの模式図を図1に示す。モデル中の原子数は約14000個であり、セルサイズは $20 \times 14 \times 1.3 \text{ nm}^3$ である。原子間相互作用として、tight-bindingポテンシャル⁽¹²⁾を用い、温度は5 Kとした。主すべり系である底面すべりを扱うため、これら双晶モデルの母相側の底面にらせん転位を導入した後、 x 軸方向のせん断ひ

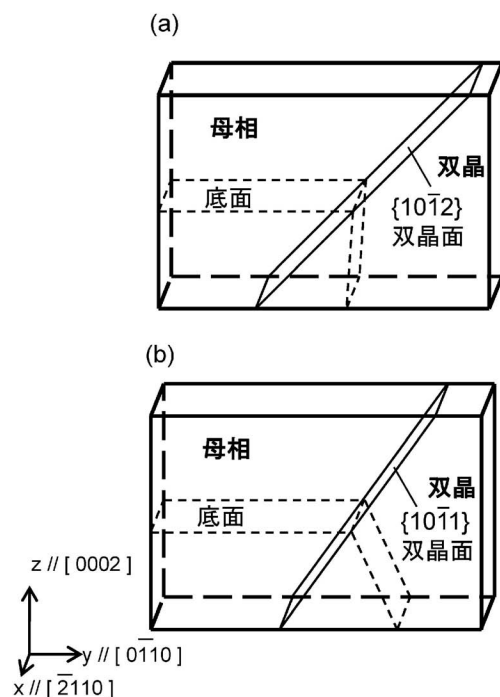


図1 マグネシウム双晶モデル(a) $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、(b) $\{10\bar{1}1\}$ 双晶⁽⁸⁾。

^{*} 同志社大学理工学部 1)助教 2)教授(〒610-0394 京田辺市多々羅都谷 1-3)

^{**} 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 構造材料研究部門；グループ長

^{***} 京都大学大学院エネルギー科学研究科；教授

Interaction of Twin Boundaries and Screw Dislocations in Mg Alloys Using Molecular Dynamics Simulations; Motohiro Yuasa*, Yasumasa Chino**, Mamoru Mabuchi***, Hiroyuki Miyamoto* (*Faculty of Science and Engineering, Doshisha University, Kyotanabe. **National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Nagoya. *** Graduate School of Energy Science, Kyoto University, Kyoto)

Keywords: molecular dynamics, magnesium, dislocation, twin boundary, segregation

2017年4月26日受理[doi:10.2320/materia.56.488]

ずみをセル全体に0.1%刻みで負荷し、構造緩和計算を繰り返すことにより、双晶と転位の相互作用を解析した⁽⁸⁾。ここで、導入したらせん転位は、 $a_0/3[2\bar{1}10] \rightarrow a_0/3[\bar{1}100] + a_0/3[10\bar{1}0]$ の反応に従って部分転位に分解し、双晶に向かって移動した。

図2に、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶とらせん転位の相互作用の原子挙動を示す。まず、部分転位の先頭転位がせん断ひずみ0.7%を負荷した時点で双晶界面に到達した(図2(a))。しかしながら、先頭転位は双晶界面に吸収されず、双晶界面から斥力を受けているように、双晶界面と一定の距離を取り続けた。この先頭転位と双晶界面の間の距離は、負荷するせん断ひずみを大きくしていくと徐々に小さくなり、せん断ひずみ1.3%で双晶界面に完全に吸収された(図2(b))。その後、せん断ひずみ1.5%で後続転位も双晶界面に到達、吸収され、先頭転位と合体した(図2(c),(d))。その後、合体した転位は、双晶界面を通過、再び部分転位に分解して双晶側の底面をすべっていった(図2(e))。このように、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶においては、転位は容易には双晶に吸収されず、双晶と転位は斥力的な相互作用をし、最終的に転位は双晶を通過することがわかった。

$\{10\bar{1}1\}$ 双晶とらせん転位の相互作用の原子挙動を図3に示す。先頭転位は、せん断ひずみ0.5%の時点で双晶界面に到達し、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶の場合と異なり、その時点で双晶界面に吸収された(図3(a),(b))。その後、せん断ひずみ1.2%で後続転位が双晶界面に到達、吸収され、先頭転位と合体した(図3(c))。合体した転位は、すぐに2つの双晶転位に分解し、双晶界面を互いに反対方向に移動した(図3(d))。本解析で生じた双晶転位は、双晶界面に対し2原子列分のステップをもっており、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶とらせん転位の相互作用に

おいて過去に報告されているものと一致した⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾。 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶においては、先頭転位、後続転位がともにそれぞれ同一のせん断ひずみで双晶界面に吸収されたことから、双晶と転位は引力的な相互作用をすることが示唆された。

前記の $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶と転位の相互作用の違いは、転位の通過や双晶転位への分解といった相互作用が起こる際のエネルギー変化に起因していると考えられる。そこで、図1で示される双晶モデルの双晶界面から一定範囲内にある原子群を抽出し、転位エネルギー差 $E_{\text{partial}} - E_{\text{no partial}}$ を定義し、エネルギー変化を検討した⁽¹⁵⁾。 E_{partial} は、原子群に部分転位が存在しているときの各原子の内部エネルギーの和であり、 $E_{\text{no partial}}$ は、同じ原子群において部分転位が存在していない時のエネルギーの和である。転位エネルギー差を後続転位と双晶の距離に対して計算した結果を図4に示す。転位エネルギー差は、後続転位の双晶からの距離が0の時は、らせん転位が完全に双晶に吸収されたときのエネルギー E_{D+TB} を表しており、双晶からの距離が0以外の時は、双晶エネルギー E_{iTB} と転位のエネルギー E_{iD} に加え、双晶と転位の相互作用によるエネルギー変化を含んだ値となる。

図4(a)より、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶では、双晶界面からの距離が-1 nm(後続転位が母相側1 nmの位置に存在)付近から転位エネルギー差が増加し、双晶に完全に吸収されたときに最も高い値をとった。これは、後続転位が双晶に近づくこと、特に双晶界面に吸収されることはエネルギー的に不安定であることを示している。この不安定性のため $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と転位の相互作用は斥力的であったと考察できる。また、転位が双晶界面に吸収された状態が不安定であるため、合体したらせん転位は、双晶界面から放出され、双晶界面を通過したと考え

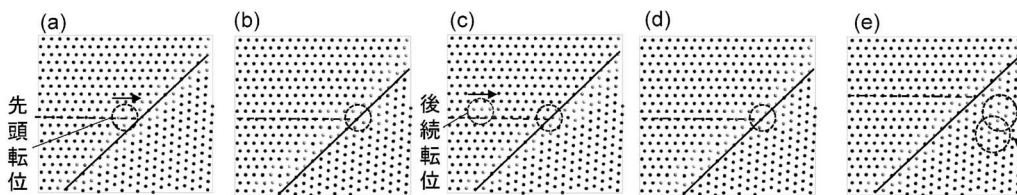


図2 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と転位の相互作用⁽⁸⁾：(a)せん断ひずみ0.7%，緩和時間5.0 ps，(b)せん断ひずみ1.3%，緩和時間2.5 ps，(c)せん断ひずみ1.5%，緩和時間2.7 ps，(d)せん断ひずみ1.5%，緩和時間9.1 ps，(e)せん断ひずみ1.5%，緩和時間11.0 ps。破線は母相における先頭転位のすべり面を示す。

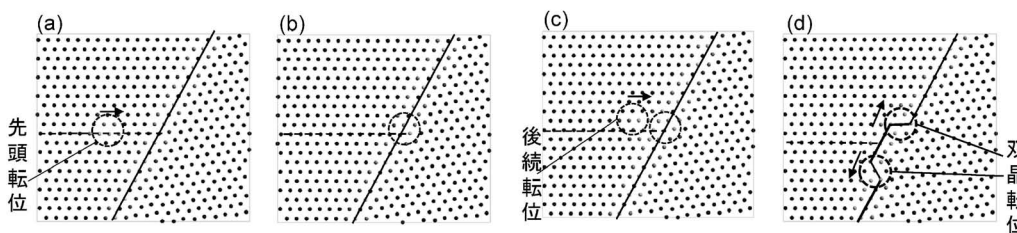


図3 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶と転位の相互作用⁽⁸⁾：(a)せん断ひずみ0.5%，緩和時間9.6 ps，(b)せん断ひずみ0.5%，緩和時間10.7 ps，(c)せん断ひずみ1.2%，緩和時間0.2 ps，(d)せん断ひずみ1.2%，緩和時間3.6 ps。破線は母相における先頭転位のすべり面を示す。

られる。

一方で、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶においては、図4(b)に示される通り、後続転位が双晶に近づくことと転位エネルギー差は減少し、双晶に吸収されたときに最も低い値をとった。これは、後続転位が双晶に近づくことがエネルギー的に安定であり、双晶に吸収された状態が最も安定であることを示唆している。この安定性のため $\{10\bar{1}1\}$ 双晶と転位の間には引力的な相互作用が存在したと考えられる。なお、図4(b)で双晶からの距離が0より大きい値において転位エネルギー差が存在しないのは、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶ではらせん転位は双晶と相互作用した後、双晶転位に分解し双晶界面上をすべるため、エネルギーが定義できないからである。

以上をまとめると、双晶と転位の距離が0であるときの転位エネルギー差、すなわち E_{D+TB} の値とそれ以外の距離における転位エネルギー差の大小により、双晶と転位の相互作用は分類できると考えられる。 E_{D+TB} の値が転位エネルギー差の値より大きい場合は、双晶と転位は斥力的な相互作用となるとともに、双晶界面に強制的に導入された転位は、双晶界面を通過し、双晶側に放出される。 E_{D+TB} の値の方が小さい場合には、双晶と転位は引力的な相互作用となり、転位は双晶に吸収され、双晶転位として双晶界面上を移動する。

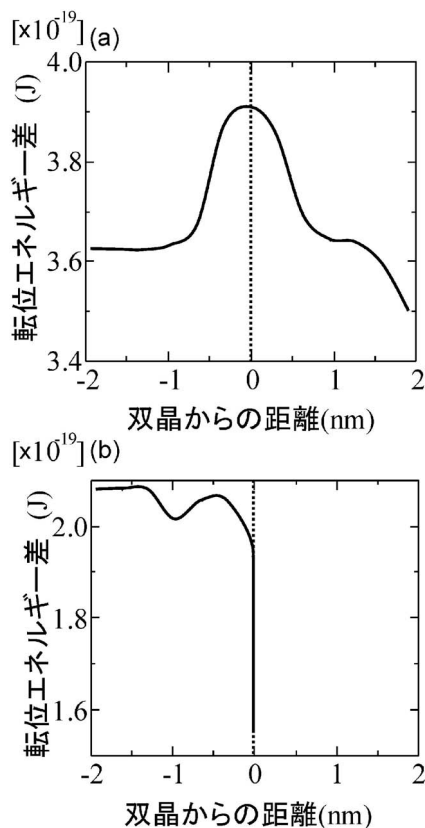


図4 転位エネルギー差と後続転位の双晶からの距離の関係⁽⁸⁾: (a) $\{10\bar{1}2\}$ 双晶, せん断ひずみ1.5%, (b) $\{10\bar{1}1\}$ 双晶, せん断ひずみ1.2%。

3. 双晶偏析が双晶と転位の相互作用に及ぼす影響

近年、マグネシウム合金の双晶界面に合金元素が周期的に偏析することにより、その力学特性が変化することが話題となっている⁽¹⁶⁾。しかしながら、合金元素の偏析がマグネシウム合金の双晶と転位の相互作用に及ぼす影響はよくわかっていないのが現状である。そこで、2章で紹介した、双晶と転位の相互作用の分子動力学計算を応用し、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶に合金元素が偏析したときの双晶と転位の相互作用を解析した⁽¹⁰⁾。

分子動力学法で、複数の元素で構成されるモデルを扱う場合、モデルに含まれるすべての元素の相互作用を扱うことのできるポテンシャルを用いる必要がある。マグネシウム合金の相互作用を扱えるポテンシャルは多くはないが、ここではAMEAMポテンシャル⁽¹⁷⁾を原子間相互作用として用いた。AMEAMポテンシャルでは、マグネシウム(Mg)、スカンジウム(Sc)、イットリウム(Y)、ネオジム(Nd)の原子間相互作用を扱うことができる。図5に本研究で用いた偏析双晶モデルにおける偏析原子の配置を示す。偏析原子(Sc, Y, Nd)の濃度の影響を調べるため、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶それぞれの偏析双晶モデルに対し、lowモデルとhighモデルの合計4種類のモデルを準備した。モデル中の原子数、セルサイズはそれぞれ約14000個、 $20 \times 14 \times 1.3 \text{ nm}^3$ とした。

$\{10\bar{1}2\}$ 偏析双晶とらせん転位の相互作用は、すべて図2で示される純Mgモデルと同じであった。すなわち、先頭転位が双晶界面に吸収された後、後続転位が双晶界面に到達、界面を通過し、双晶側の底面を移動した。しかしながら、偏析原子の種類と濃度により、双晶界面を転位が通過したひずみが増加した。その結果をまとめたものを表1に示す。いずれの偏析双晶モデルにおいても、純Mgモデルに

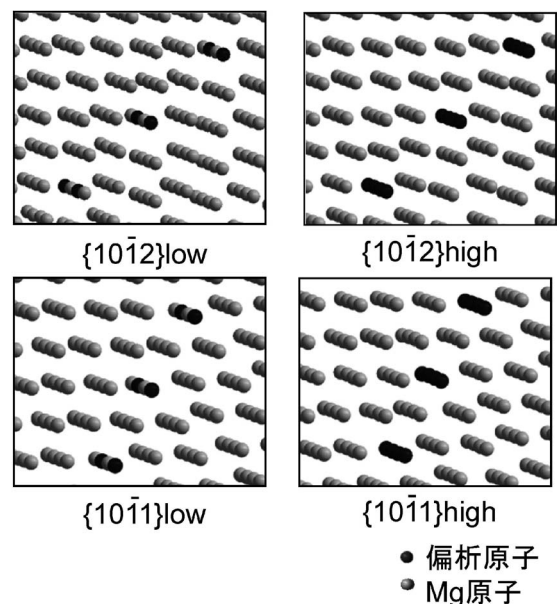


図5 偏析双晶モデル⁽¹⁰⁾。

表1 各計算モデルで転位が{10 $\bar{1}2$ }双晶界面を通過したひずみ⁽¹⁰⁾.

純 Mg	Mg-Sc		Mg-Y		Mg-Nd	
	low	High	low	High	low	High
1.9%	2.1%	2.4%	2.3%	3.0%	2.3%	2.6%

表2 各計算モデルにおける{10 $\bar{1}1$ }双晶と転位の相互作用⁽¹⁰⁾.

モデル	濃度	相互作用
純 Mg	—	パターン1: 後続転位が界面に吸収された後, 双晶転位となり界面をすべる
Mg-Sc	Low	パターン1: 後続転位が界面に吸収された後, 双晶転位となり界面をすべる
	High	パターン1: 後続転位が界面に吸収された後, 双晶転位となり界面をすべる
Mg-Y	Low	パターン2: 後続転位が界面に吸収された後, 部分転位が双晶内をすべる
	High	パターン4: 後続転位が界面に吸収される前に, 部分転位が双晶内をすべる
Mg-Nd	Low	パターン3: 後続転位が界面に吸収された後, 部分転位が母相内をすべる
	High	パターン4: 後続転位が界面に吸収される前に, 部分転位が双晶内をすべる

比べて双晶を通過したひずみが増加しており, しかも low モデルに比べて high モデルの方が, そのひずみは大きかった. すなわち, {10 $\bar{1}2$ }双晶への Sc, Y, Nd 原子の偏析は, 相互作用における原子挙動自体は変化させないが, 転位の通過を妨げ, {10 $\bar{1}2$ }双晶の転位の堆積力を向上, すなわち, 加工硬化能を向上させる可能性が示唆された.

{10 $\bar{1}1$ }偏析双晶とらせん転位の相互作用は, {10 $\bar{1}2$ }偏析双晶の場合と異なり, その相互作用の原子挙動自体が変化した. その結果を表2にまとめて示すとともに, その原子挙動を図6に示す. 表2より, Mg-Sc モデルは, 純 Mg と同じパターン1の相互作用となったが, Mg-Y, Mg-Nd モデルでは, パターン2~4の異なる相互作用が観察された. パターン2では, 後続転位が双晶仮面に吸収された後, 双晶界面に残留転位を残したまま双晶内に部分転位が放出された. パターン3では, 後続転位が双晶仮面に吸収された後, 双晶界面に残留転位を残したまま母相内に部分転位が放出された. パターン4は, 後続転位が双晶界面に吸収される前に, 双晶界面から双晶内に部分転位が放出された.

以上のように, 双晶界面に別の原子が偏析することにより, {10 $\bar{1}2$ }双晶では, 転位の通過に必要なひずみが増加し, {10 $\bar{1}1$ }双晶では, 転位との相互作用の原子挙動自体が変化することがわかった. この相互作用の変化を解析するため, 2章で計算したエネルギーを用いて相互作用エネルギー $E_{D+TB} - (E_{ITB} + E_{ID})$ を定義し, エネルギー解析を行った⁽⁸⁾. ここで, $(E_{ITB} + E_{ID})$ の値は, 図4において後続転位

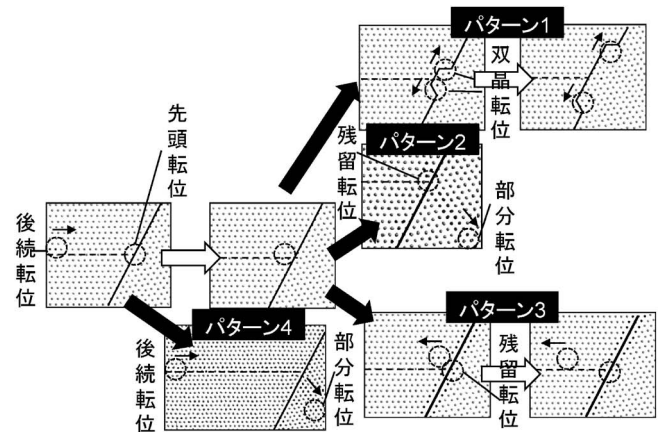


図6 {10 $\bar{1}1$ }偏析双晶と転位の相互作用のまとめ⁽¹⁰⁾. 破線は母相における先頭転位のすべり面を示す.

表3 各計算モデルにおける双晶と転位の相互作用エネルギー⁽¹⁰⁾.

双晶と転位の相互作用エネルギー (10^{-20} J)							
	純 Mg	Mg-Sc		Mg-Y		Mg-Nd	
		Low	High	Low	High	Low	High
{10 $\bar{1}2$ }双晶	9.4	10	28	10	54	10	46
{10 $\bar{1}1$ }双晶	-3.3	-2.0	-6.7	4.1	4.5	3.8	4.4

が双晶から十分離れており, 転位エネルギー差が一定となっている値とした. 相互作用エネルギーが正の時, 双晶と転位は別々に存在している方が, 転位が双晶に吸収されているよりも安定となることを意味している. 一方で, 相互作用エネルギーが負の時は, 双晶と転位は別々に存在しているよりも, 転位が双晶に吸収されている方が安定であることを意味している. 各計算モデルにおいて, この相互作用エネルギーを計算した結果を表3に示す.

表3より, すべての{10 $\bar{1}2$ }偏析双晶モデルは, 相互作用エネルギーが正の値であった. また, 相互作用エネルギーの値と表1の双晶界面を通過したひずみは, 定性的に同じ傾向を示した. これは, 相互作用エネルギーが大きいくほど, 別々に存在している双晶と転位を合体させるために大きなエネルギーが必要であるためと考えられる. すなわち, 双晶界面に偏析原子が存在することにより, 転位が双晶に吸収されるために必要なエネルギーが増加し, それに伴って双晶を通過するためのひずみが大きくなったと考えられる.

{10 $\bar{1}1$ }偏析双晶モデルにおいては, 純 Mg と Mg-Sc モデルでは, 相互作用エネルギーが負であったが, Mg-Y, Mg-Nd モデルでは, 正となった. 相互作用エネルギーが負であった Mg-Sc モデルは, 双晶界面に Sc 原子が偏析したとしても, 転位は双晶に吸収された方が安定であるため, 純 Mg モデルと同じパターン1の相互作用のままであったと言える. それに対して, 相互作用エネルギーが正となった Mg-Y, Mg-Nd モデルでは, 双晶界面に Y, Nd 原子が偏析した

マグネシウムの破壊挙動に関する 分子動力学解析

松 中 大 介* 渋谷 陽 二**

1. はじめに

マグネシウム(Mg)は構造用金属材料の中で比重が低く、自動車や航空機などの輸送機器をはじめとして様々な用途への適用に期待が高まっており、省エネルギー社会の実現に資する軽量構造材料として注目されている⁽¹⁾⁽²⁾。しかし、室温域における延性や靱性が低く、成形性に劣ることや、耐食性、耐熱性、耐クリープ性が低いことなどが、Mg材料の幅広い実用化のための課題として残っている。特に、Mg材料を構造用部材に対して使用するためには破壊靱性の向上は重要である。

多結晶材料の十分な塑性変形のためには、フォン・ミーゼスの条件から5つの独立なすべり系が必要である。HCP構造を持つMgにおいては、室温で駆動するすべり変形が底面すべりに限られており、非底面すべりに対する臨界分解せん断応力(CRSS)は非常に高い⁽³⁾。そのため、すべり系の不足を補うために双晶変形が重要な役割を担う。c軸に対して引張応力で駆動する(10 $\bar{1}$ 2)双晶はCRSSが極めて低く⁽⁴⁾、変形初期から発生して塑性変形に寄与する⁽⁵⁾。また、(10 $\bar{1}$ 1)双晶や二重双晶に関しては、双晶界面に沿った破壊が観察されている⁽⁶⁾⁽⁷⁾。したがって、塑性変形の過程で発生する変形双晶が破壊に関係しており、Mg材料では延性と破壊靱性を分けて理解することができないことになる。そのため、き裂・転位・双晶といった欠陥間の相互作用を理解することが重要である。

本稿では、著者らが分子動力学法(MD)を用いて行ってきたMg中のき裂に関する原子論的解析⁽⁸⁾⁻⁽¹⁰⁾について紹介する。

2. バルク中のき裂先端場

き裂進展に対して、生成されるき裂面の表面エネルギーは重要なパラメータである。MgはHCP構造で対称性が低いことから、それぞれの面方位の表面エネルギーの違いがき裂

進展に影響することになる。また、応力の負荷方向によって活動するすべり系や双晶系が異なるため、き裂先端に生じる塑性変形機構が進展の方位に依存する。そのためMgにおけるき裂先端場は方位に依存することが考えられる。そこで、バルク中でのき裂先端場の挙動を解析するために、図1に示すような初期き裂を導入した円柱形の原子モデルを用いた解析を行った⁽⁸⁾。モデルの直径は22 nm、軸方向(z方向)のサイズは2 nmであり、原子数は約25000個である。この原子モデルの全原子に対して、Sihらによる異方性線形弾性体のモードIき裂に対する変位場⁽¹¹⁾を応力拡大係数 $K_I = 0.7 \text{ MPam}^{1/2}$ として与え、外周の原子を固定して300 psの緩和を行った。

Mg原子間の経験的原子間ポテンシャルとして、SunらによるEmbedded Atom Method (EAM)ポテンシャル⁽¹²⁾とZhouらによるGeneralized Embedded Atom Method (GEAM)ポテンシャル⁽¹³⁾を適用した。この2つのポテンシャルは格子定数や弾性定数がほぼ同じであるが、表面エネルギーが異なる。表面エネルギー γ_{surf} 、ヤング率 E 、参考値と

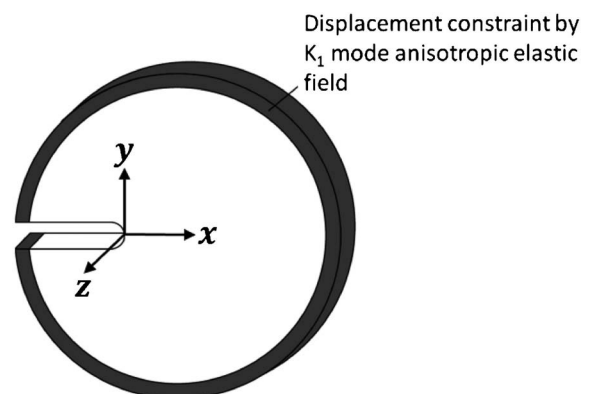


図1 き裂先端場の解析モデル図⁽⁹⁾。

* 信州大学学術研究院工学系；准教授(〒380-8553 長野市若里 4-17-1)

** 大阪大学大学院工学研究科；教授

Molecular Dynamics Study of Fracture Behavior of Magnesium; Daisuke Matsunaka*, Yoji Shibutani** (*Department of Mechanical Systems Engineering, Shinshu University, Nagano. **Department of Mechanical Engineering, Osaka University, Suita)

Keywords: crack, twin boundary, dislocation, defect interaction, molecular dynamics, magnesium

2017年4月20日受理[doi:10.2320/materia.56.493]

表1 原子間ポテンシャルによる表面エネルギー γ_{surf} [J/m²], ヤング率 E [GPa], Griffith 理論による臨界応力拡大係数 K_{Ic} [MPa m^{1/2}]⁽⁹⁾.

		(0001)	(10 $\bar{1}$ 0)	(10 $\bar{1}$ 1)	(10 $\bar{1}$ 2)
γ_{surf}	EAM	0.167	0.230	0.165	0.274
	GEAM	0.308	0.337	0.259	0.309
	DFT(GGA)	0.549	—	—	—
E	EAM	65.4	58.2	59.0	60.0
	GEAM	59.8	39.6	36.8	38.7
K_{Ic}	EAM	0.148	0.164	0.139	0.181
	GEAM	0.192	0.160	0.138	0.155

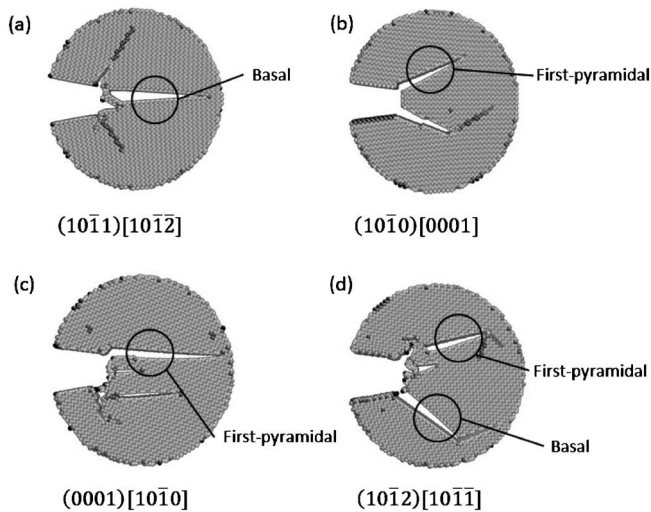


図2 EAM を用いたバルク中のき裂先端場の解析のスナップショット⁽⁸⁾.

して Griffith 理論による K_{Ic} 値 ($K_{Ic} = \sqrt{2E\gamma_{\text{surf}}}$) を表1に示す⁽⁹⁾. EAM では底面と(10 $\bar{1}$ 1)の表面エネルギーが低く, 一方 GEAM ではそれらの表面エネルギーは比較的高く評価されている. 底面の表面エネルギーに関して, 第一原理計算による計算値⁽¹⁴⁾に比べて EAM と GEAM のいずれのポテンシャルの値も低い, 2つのポテンシャルをそれぞれ用いた解析から表面エネルギーの変化がき裂進展に及ぼす影響を調べることができる.

EAM と GEAM を用いて解析を行った場合のスナップショットを図2と図3に示す. 初期き裂を底面に平行に導入したモデルでは, 底面すべりは力学的に生じにくく, 1次錐面すべりがき裂先端から駆動した. その後, 表面エネルギーの低い EAM を用いた場合では, き裂開口が生じた. この新生表面は図2(a)のスナップショットに見られるように元のき裂面と同じ底面である. 一方, 表面エネルギーを比較的高く評価する GEAM を用いた場合では, き裂先端で双晶が形成された(図3(a)). この双晶は(10 $\bar{1}$ 2)双晶であり, き裂先端での c 軸引張応力によって双晶変形が駆動したものである.

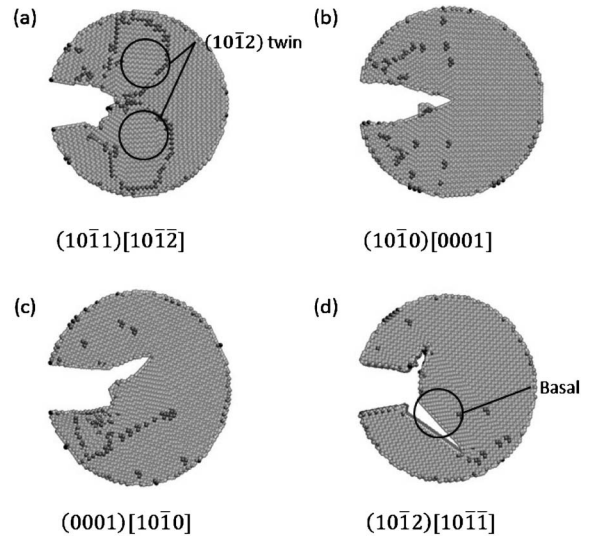


図3 GEAM を用いたバルク中のき裂先端場の解析のスナップショット⁽⁸⁾.

き裂先端では新生表面の形成と転位の射出が競合しており, 2種類の原子間ポテンシャルによって相対的に表面エネルギーを変化させたことにより, EAM での脆性的なき裂進展から GEAM でのき裂先端の塑性変形へと遷移したと考えられる. そのような表面エネルギーによるき裂先端場の挙動の違いは, 他の初期き裂面の原子モデルに対しても見てとれる. EAM を用いた場合, き裂先端から底面転位をいくつか射出するものの, 底面あるいは(10 $\bar{1}$ 1)のへき開によるき裂進展が見られた. 表面エネルギーの高い GEAM の場合では, 先端での新生表面の形成が抑制され, 継続して転位が射出されていき, 上下対称に底面転位を射出する柱面の方向に鈍化しながら進展した. このように Mg 中のき裂先端場の挙動は表面エネルギーと塑性変形機構の違いのために方位依存性が強い. また, ここでは表面エネルギーの異なる2つの原子間ポテンシャルを用いた解析を比較したが, 現実の合金系では添加元素によって表面エネルギーや塑性変形機構が変化することでき裂先端場の挙動が影響を受けると考えられる.

3. 双晶近傍でのき裂伝播

Mg の塑性変形においては双晶変形も駆動するため, 双晶境界近傍でのき裂の伝播について明らかにする必要がある. き裂先端からは転位の射出が生じるため, き裂・転位・双晶の欠陥間相互作用を考慮する問題となる. そこで, 図4に示すように双晶境界に対して平行な片側き裂を導入した原子モデルを用いて解析を行った⁽⁹⁾. 解析対象として, (10 $\bar{1}$ 2)双晶と(10 $\bar{1}$ 1)双晶を考え, [10 $\bar{1}$ 1]または[10 $\bar{1}$ 2]を x 方向, 双晶の各 K_1 面に垂直な方向を y 方向, [1 $\bar{2}$ 10]を z 方向とした. (10 $\bar{1}$ 2)双晶のモデルサイズは, $L_x = 34.3$ nm, $L_y = 30.2$ nm, $L_z = 1.9$ nm であり, 原子数は約76000個である. ま

た、 $(10\bar{1}1)$ 双晶のモデルサイズは、 $L_x=39.2$ nm, $L_y=29.4$ nm, $L_z=1.9$ nm であり、原子数は約85000個である。x方向には自由境界条件、y方向とz方向には周期境界条件を課し、同じ厚さの母相・双晶のブロックがy方向へ交互に積み重なるモデルを考えている。そのため双晶境界間の距離は $d_{TB}=L_y/2$ である。y方向のセルサイズを変化させてモードI型の変位を与え、z方向にセルを緩和して平面応力状態で解析を行った。なお、温度は1 Kで、セル全体のひずみ速度は 1×10^8 s⁻¹とし、Mg原子間にはSunらのEAMポテンシャル⁽¹²⁾を適用した。

$(10\bar{1}2)$ 双晶に対する解析のスナップショットを図5に示す。き裂先端から射出された底面転位と双晶境界の反応によって双晶転位が生じている。また表面からも双晶転位の導入が見られた。これは $(10\bar{1}2)$ 双晶の双晶転位のエネルギーが小さいことを反映していると思われる⁽¹⁵⁾。さらに、双晶境界に平行なパーガースペクトルを持つ双晶転位は双晶境界上を運動することができ双晶の生長・縮小に寄与するが、 $(10\bar{1}2)$ 双晶の双晶転位は極めて易動度が高い。Nudged Elastic Band(NEB)法によって評価されたパイエルズ障壁は

0.004 meV/Å程度であり非常に小さい⁽¹⁵⁾。そのため、変位を加えていくと容易に移動して最終的には双晶の領域が消失した。 $(10\bar{1}2)$ 双晶はCRSSが低く変形初期から活発に駆動するが、この解析結果から、き裂との相互作用によって $(10\bar{1}2)$ 双晶境界上で新たなき裂核の形成やき裂の伝播は難しいと考えられる。

次に $(10\bar{1}1)$ 双晶境界近傍のき裂について考える。図6にき裂の位置を双晶境界上とした場合の解析のスナップショットを示す。き裂先端からの底面転位の射出が起きにくく、先端領域の原子配列が乱れた。そしてき裂が進展するよりも先にセル中のもう一方の双晶境界と表面の交わる領域から $(10\bar{1}3)$ 双晶が形成され、母相・双晶ブロックの両方へ生長した。その後さらに変位を加えることで、双晶境界上で不安定なき裂進展が生じた。

き裂が双晶境界から $0.2d_{TB}$ 離れた場合では、図7に示す

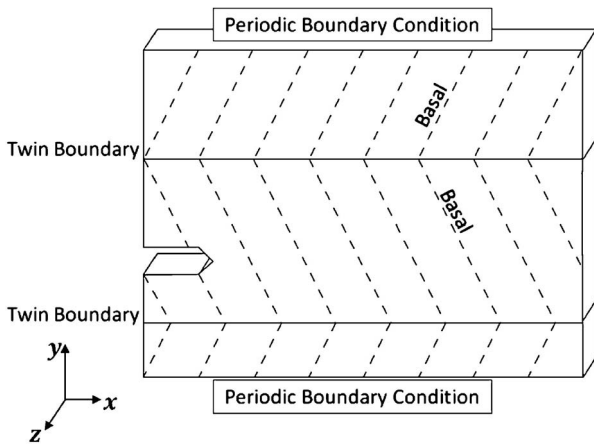


図4 き裂と双晶境界を含む解析モデル⁽⁹⁾。

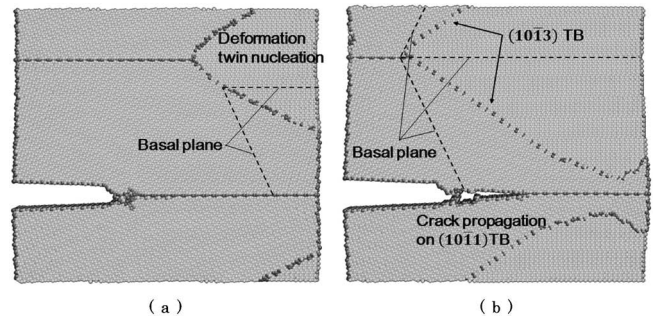


図6 $(10\bar{1}1)$ 双晶境界上のき裂に対するMD解析のスナップショット⁽⁹⁾。

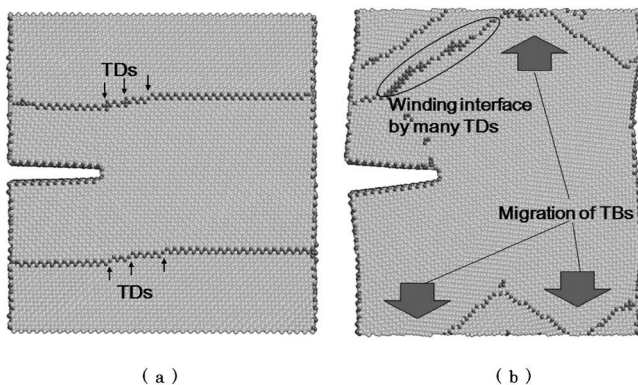


図5 $(10\bar{1}2)$ 双晶境界とき裂のMD解析のスナップショット⁽⁹⁾。

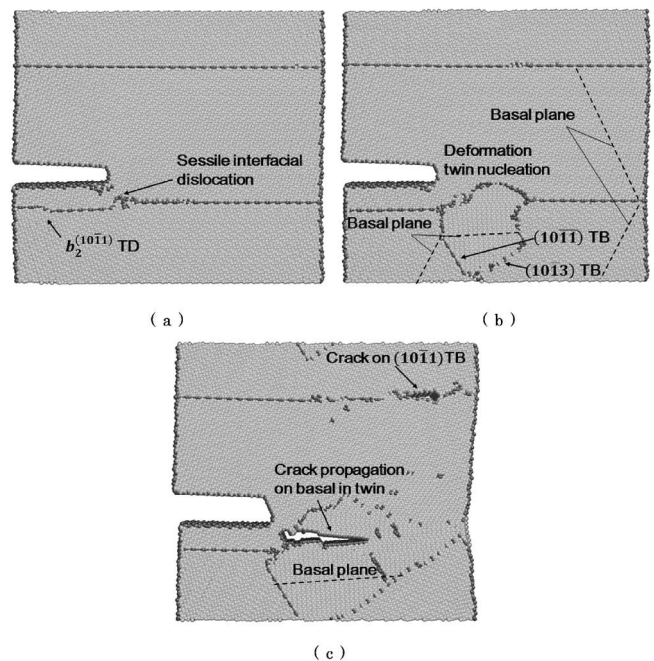


図7 $(10\bar{1}1)$ 双晶境界近傍($0.2d_{TB}$)のき裂に対するMD解析のスナップショット⁽⁹⁾。

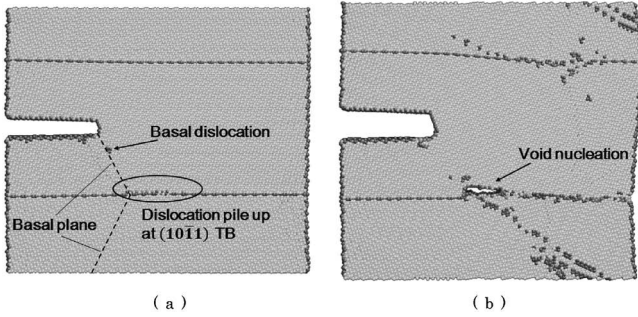


図8 (10 $\bar{1}1$)双晶境界から離れた(0.5 d_{TB})のき裂に対するMD解析のスナップショット⁽⁹⁾.

ようにき裂先端から射出された底面転位が双晶境界上で堆積し、その不均一領域にき裂近傍の応力集中が影響して双晶境界上にステップが形成された。図7(a)の左側に見られる双晶境界上のステップは K_1 面2層分であり、 $b_2^{(10\bar{1}1)} = (4r^2 - 9/8r^2 + 6)[10\bar{1}2] \pm (1/6)[1\bar{2}10]$ のバーガースベクトルを持つ双晶転位だと考えられる。ここで、 $r = c/a$ である。発生した $b_2^{(10\bar{1}1)}$ 双晶転位はき裂後方に移動して表面に抜けた。一方、図7(a)においてき裂近傍にあるステップは反応によって残されたものであり、双晶境界に平行でないバーガースベクトルを持つ界面転位だと考えられる。この界面転位は双晶境界上を移動せず、図7(b)のように、き裂先端から後続して射出された転位とさらに反応し新たな双晶を形成した。この双晶はき裂を含まない双晶ブロックに対して(10 $\bar{1}\bar{1}$)双晶境界および(10 $\bar{1}3$)双晶境界を持っており、その底面は xz 平面と平行に近い結晶方位である。そして、さらに変位を加えていくと、図7(c)に示すように、この形成された双晶内部での底面に沿ったき裂の発生・進展が見られた。

双晶境界からの距離が0.5 d_{TB} でき裂が領域の中央に位置する場合も、き裂先端から底面転位が射出され、双晶境界上で堆積していった(図8(a))。そして図8(b)のように堆積した転位によってポイドが発生した。コヒーレントな(10 $\bar{1}1$)双晶境界は、第一原理計算による(10 $\bar{1}1$)双晶境界エネルギーが84 mJ/m²で(10 $\bar{1}2$)双晶境界エネルギーの125 mJ/m²よりも低く、比較的安定な面欠陥であり、(10 $\bar{1}1$)双晶の双晶転位のエネルギーは高い⁽¹⁵⁾。そのため、転位と双晶境界は反応しにくく、き裂先端から射出された転位は双晶境界近傍に堆積していったと考えられる。

最近著者らは、より大きいモデルサイズを用い、き裂と(10 $\bar{1}1$)双晶境界の距離をさらに変化させて解析を進めた⁽¹⁰⁾。き裂と双晶境界が離れた状態では、き裂がそのままバルク内を伝播する場合と、図9に示すように、先端から射出された底面転位が同一すべり面上に堆積し、その後双晶境界上にポイドが発生した場合が見られた。き裂進展が見られたときの y 方向の変位 v_c を用い、両端面が一樣に変形を受ける等方弾性体中の片側き裂の解析解⁽¹⁶⁾に対して応力拡大係数を見積ると、バルク内を伝播した場合はおおそ

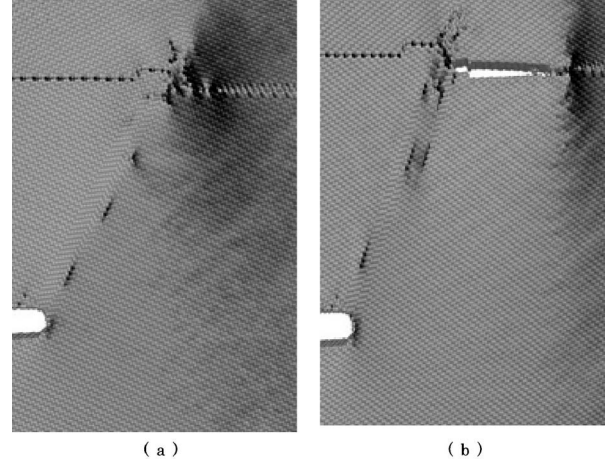


図9 (10 $\bar{1}1$)双晶境界に堆積した転位による遮蔽効果⁽¹⁰⁾.

$K_{Ic} = 0.28 \text{ MPam}^{1/2}$ であった。このようなMD解析におけるき裂先端はnmサイズであるが、実際の材料中のき裂先端が μm 程度の半径で特徴づけられると仮定すると10 MPam^{1/2}に相当する。一方、(10 $\bar{1}1$)双晶境界上をき裂が進展する場合は $K_{Ic} = 0.32 \text{ MPam}^{1/2}$ であり、バルク内に比べて破壊靱性が高い。しかし、き裂先端から射出された底面転位が同一すべり面上に堆積していき、き裂先端に近い転位が有効的に遮蔽効果を与えることで応力拡大係数は減少する。図9(a)に見られるMD解析における堆積した転位の位置に基づいて、遮蔽効果を含む応力拡大係数⁽¹⁷⁾を見積ると0.22 MPam^{1/2}であり、バルク内の K_{Ic} より低くなる。一方、堆積した転位による双晶境界上の応力集中によりポイドが発生した。すなわち、遮蔽効果の結果としてき裂の経路がバルク中から双晶境界へ移ったと考えられる。

4. ま と め

本稿ではMD法を用いたMg中のき裂に関する原子論的解析について紹介した。HCP構造を有するMg中のき裂先端場の挙動は表面エネルギーや塑性変形機構の違いのために方位依存性が強い。また、双晶近傍でのき裂伝播の理解には、き裂、射出された転位、双晶境界の間の欠陥間相互作用が重要である。

このような計算科学的アプローチから得られた知見は、実験研究との連携によって、HCP金属の複雑な力学挙動の理解を進め、強度・延性・破壊靱性をバランス良く持つMg材料の設計につながると期待される。

文 献

- (1) S. R. Agnew and J. F. Nie: Scr. Mater., **63**(2010), 671-673.
- (2) K. U. Kainer, H. Yuanding, H. Dieringa and N. Hort: Mater. Sci. Forum, **638-642**(2010), 73-80.
- (3) B. C. Wonsiewicz and W. A. Backofen: Trans. Metall. Soc.

- AIME, 239(1967), 1422-1431.
- (4) M. H. Yoo: Metall. Trans. A, 12(1981), 409-418.
 - (5) J. Koike: Metall. Mater. Trans. A, 36(2005), 1689-1696.
 - (6) 吉永日出男: 軽金属, 59(2009), 450-457.
 - (7) D. Ando, J. Koike and Y. Sutou: Acta Mater., 58(2010), 4316-4324.
 - (8) 松中大介, 大西恭彰, 渋谷陽二: 日本機械学会 M&M2013 材料力学カンファレンス講演論文集, (2013), OS0420.
 - (9) 松中大介, 渋谷陽二, 大西恭彰: 材料, 65(2016), 141-147.
 - (10) Y. Shibutani and D. Matsunaka: Solid State Phenom., 258(2017), 11-16.
 - (11) G. C. Sih, P. C Paris and G. R. Irwin: Int. J. Fract. Mech., 1(1965), 189-203.
 - (12) D. Y. Sun, M. I. Mendeleev, C. A. Becker, K. Kudin, T. Haxhimali, M. Asta, J. J. Hoyt, A. Karma and D. J. Srolovitz: Phys. Rev. B, 73(2006), 024116.
 - (13) X. W. Zhou, R. A. Johnson and H. N. G. Wadley: Phys. Rev. B, 69(2004), 144113.
 - (14) E. Wachowicz and A. Kiejna: J. Phys. Condens. Matter, 13(2001), 10767-10776.
 - (15) D. Matsunaka, A. Kanoh and Y. Shibutani: Mater. Trans., 54(2013), 1524-1527.
 - (16) 岡村弘之: 線形破壊力学入門, 培風館, (1976).
 - (17) T. Shimokawa, M. Tanaka, K. Kinoshita and K. Higashida: Phys. Rev. B, 83(2011), 214113.

★★

松中大介
 2005年 大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻 博士後期課程修了
 2005年 日本学術振興会 特別研究員(PD)
 2005年 大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻 助手, 助教
 2015年 現職
 専門分野: 計算材料科学
 ◎材料特性に関する計算科学的研究に従事. 第一原理計算や分子動力学法による欠陥構造解析を中心に活動.

★★



松中大介



渋谷陽二

フェーズフィールド法による LPSO 相晶出の駆動力計算

大出 真知子*

1. はじめに

マグネシウムは資源的に豊富でリサイクル性にも優れている。また、比重がアルミニウムの約2/3、鉄の1/4と実用構造材料中で最軽量であり、さらに熱伝導性や電磁遮断性に優れた性質を持つことからグリーンイノベーションを加速する材料として大きな期待が掛けられている。しかし、マグネシウム合金の機械的性質がアルミニウム合金に対し優位ではなかったため、その応用範囲は限られていた。

しかし2001年、長周期積層構造：LPSO (Synchronized Long-Period Stacking Ordered Structure)を含むMg基合金が実用Al合金と同等以上の強度と延性を示すことが見出され⁽¹⁾、その実用化研究が注目を集めている。LPSO-Mg合金の成分は、Mg基材に遷移金属(Al, Co, Ni, Cu, Znなど)とレアメタル(Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tmなど)を1~2at%添加した三元系合金である。これらの合金はLPSO相が α -Mg初相凝固後に2次相として晶出する合金(Type-I)と、凝固完了後の熱間加工中に析出する合金(Type-II)に分けられる⁽²⁾。このType-IとType-IIの違いは、各合金でのLPSO相の安定性、晶出の駆動力と核生成頻度等々によって決まると考えられるが、核生成を論じる理論は未だ発展途上にある。そのため本研究では、Type-IからMg-Y-Zn合金、Type-IIからMg-Gd-Zn合金を選択し、フェーズフィールド法を用いた凝固計算から、LPSO相晶出のための熱力学的駆動力計算を行い、2つの合金の差異について考察を行った。

フェーズフィールド法は、材料のマイクロ組織形成計算手法として広く使われている。その理由のひとつに、CALPHAD法で評価・蓄積されてきた熱力学データベースとの連携性が挙げられる。本研究ではLPSO-Mg合金のCALPHADデータ利用に際し、高速・安定計算を目的として従来とは異なるケミカルポテンシャルをインデックスとするテーブル形式を用いた。

2. 計算方法

(1) フェーズフィールド方程式

フェーズフィールド法では、相の状態を表すフェーズフィールド、 ϕ と呼ばれる変数を用いる。例えば凝固を計算対象とする場合、 ϕ は固相率の関数で、 $\phi=0$ で液相、 $\phi=1$ で固相、 $0<\phi<1$ が固液界面に対応する。フェーズフィールドは濃度場と同様、 ϕ の等高線を描くことで相の分布状態を知ることができる。すなわち、式(1)で表されるフェーズフィールド方程式を解くことで、凝固マイクロ組織の時間変化は計算できる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (1)$$

上式はフェーズフィールドの時間変化はマイクロ組織が熱力学平衡状態に最も早く達する経路で起こると仮定している。系の自由エネルギー F は構成する各相の自由エネルギーと界面エネルギーを表す ϕ の勾配の積分として表す。

$$F = \int \left\{ f(\phi, c, T) + \frac{\epsilon^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right\} dV \quad (2)$$

ここで、

$$f = h(\phi)f^S(c^S) + (1-h(\phi))f^L(c^L) + W_g(\phi) \quad (3)$$

であり、 $h(\phi)$ は、 $h(0)=0$ 、 $h(1)=1$ を満たすなめらかな単調増加関数で固相率、 $g(\phi)$ は $g(0)=g(1)$ を満たす2重井戸型関数である。

図1に f を変数 ϕ 、 c 軸に沿って描いた概念図を示す。 ϕ 軸について、凝固の場合 $T < T_m$ (融点)であるため、 $\phi=1$ で f は最小となり、界面領域： $0 < \phi < 1$ にはエネルギー障壁 $g(\phi)$ と $(\nabla \phi)^2$ 項分が追加され、2重井戸型となる。一方、濃度軸に沿った関数は2重井戸型ではなく、界面領域では直線となる。これは、界面における濃度が下記のとおり、ケミカルポテンシャルの等しい異なる濃度を持つ固相と液相の混合領域として定義されるためである。

$$c_i(x) = h(\phi)c_i^S + (1-h(\phi))c_i^L \quad (i=Y \text{ or } Zn). \quad (4)$$

* 物質材料研究機構；主任研究員(〒305-0047 つくば市千現 1-2-1)

Application of Chemical-potential-based Database to the Phase-field Model to Simulate Solidification of Mg-based LPSO Alloys; Machiko Ode (National Institute for Materials Science, Tsukuba)

Keywords: phase-field model, calphad (calculation of phase-diagram), magnesium alloy, lpsos (synchronized long-period stacking ordered structure), nucleation

2017年5月29日受理[doi:10.2320/materia.56.498]

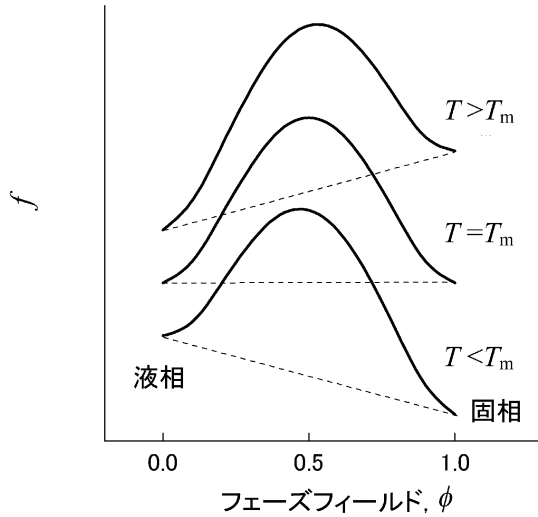


図1 自由エネルギー密度関数の概略図。

$$\frac{\partial f^S}{\partial c_1^S} = \frac{\partial f^L}{\partial c_1^L} = \tilde{\mu}_i \quad (5)$$

この界面の濃度計算については、自由エネルギー関数と共に次に詳解する。式(1)に式(2)から(5)を用いることで、フェーズフィールド支配方程式は次のように得られる⁽³⁾。

$$\frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - W \frac{dg(\phi)}{d\phi} + (f^L(c_1^L, c_2^L) - f^S(c_1^S, c_2^S)) - (c_1^L - c_1^S) \tilde{\mu}_i \frac{dh(\phi)}{d\phi} \quad (6)$$

さらに、2つ目の支配方程式として下記の濃度方程式を連立する⁽³⁾。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot h(\phi) D_1^S \nabla c_i^S + \nabla \cdot (1-h(\phi)) D_1^L \nabla c_i^L + \nabla \cdot \alpha_i(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\Delta \phi}{|\Delta \phi|} \quad (7)$$

計算に用いたパラメーターと物性値はそれぞれ表1, 2である。

(2) CALPHAD データベースとの連携

熱力学的な系が熱力学的平衡状態にある場合、系の自由エ

表1 支配方程式中の関数/パラメーター。

$g(\phi)$	$\phi^2(1-\phi)^2$
$h(\phi)$	ϕ or $\phi^2(3-2\phi)$
ε and W	$\sqrt{\frac{6}{\kappa}} \lambda \sigma, 3\kappa \frac{\sigma}{\lambda}$ ($\kappa=2.2$)
M_ϕ^{-1}	$\frac{a_2 \varepsilon^2}{a_1 2W} \zeta,$ $a_1 = \frac{1}{6}, a_2 = \frac{5}{6}, \zeta = \frac{1}{D_Y^L} \frac{\partial^2 f^L}{\partial c_Y^L} (c_Y^L - c_Y^S)^2 + \frac{1}{D_{Zn}^L} \frac{\partial^2 f^L}{\partial c_{Zn}^L} (c_{Zn}^L - c_{Zn}^S)^2$
$\alpha_i(\phi)$	$\frac{\varepsilon}{\sqrt{2W}} \frac{h(\phi)(1-h(\phi))}{\sqrt{g(\phi)}} (c_1^L - c_1^S)$

表2 計算条件/物性値。

計算メッシュサイズ, $dx, \mu\text{m}$	0.05
拡散係数, $D, \text{m}^2/\text{s}$ (固相)	3.0×10^{-12}
(液相)	3.0×10^{-9}
界面エネルギー, $\sigma, \text{J}/\text{m}^2$	0.1
界面幅(7 dx), $\lambda, \mu\text{m}$	0.35

ネルギーは最小となる。コンピュータを用いて実験状態図情報などを取り込みつつ系を構成する相の自由エネルギー関数を決定し、エネルギー最小条件から平衡状態図を描画する試みは、CALPHAD(CALculation of PHase Diagram)法と呼ばれ⁽⁴⁾、その発展と共に蓄積されてきた自由エネルギー関数データベースは、材料開発の基礎資料として大変有用である。フェーズフィールド方程式はCALPHAD法によって評価された自由エネルギー関数を $f^S(c^S), f^L(c^L)$ として、式(6)中に直接引用することができる。本計算では、Mg-Y-Zn系では文献⁽⁵⁾、Mg-Gd-Zn系ではThermoTech社のTTMG-4(Mg-based Alloys Database-4)⁽⁶⁾の自由エネルギーを参照した。

CALPHAD法とフェーズフィールド法を連携する場合、自由エネルギー関数を支配方程式に引用することに加えて、式(4)、(5)の連立による界面濃度の計算が必要となる。この界面濃度計算を逐次計算していると計算時間が掛かるため、事前に式(5)を満たす液相濃度と分配係数の組み合わせ、 $c_1^L, c_2^L, k_1(c_1^L, c_2^L), k_2(c_1^L, c_2^L)$ を計算したデータテーブルを別途用意し、それを必要に応じ補間して計算した⁽⁷⁾。データテーブルは c_1^L を0.1 at%毎に取得し、界面濃度計算時には格納データを式(4)に入力、式(8)から誤差最小となるデータと隣接データ計3点から内挿している。

$$\Delta c = \Delta c_1 + \Delta c_2 = c_1 - \{h(\phi)k_1(j)c_1^L(j) + (1-h(\phi))c_1^L(j)\} + c_2 - \{h(\phi)k_2(j)c_2^L(j) + (1-h(\phi))c_2^L(j)\} \quad (8)$$

この誤差収束計算の計算プロセスでは、 $k \ll 1$ の場合など、式(8)における固相濃度由来の誤差が液相の誤差に比べて過小評価される可能性がある。しかし、データベースに格納する濃度間隔を狭めることは計算時間の増大を引き起こす。

また、たとえば式(8)の各項に重み付け関数などを加え誤差補正を行うことは、経験的知見を必要とするため現実的ではない。しかし、式(8)で生じた濃度誤差はシミュレーションを破綻させる可能性を孕んでいる。 Δc の微小誤差は界面の駆動力を求める過程で増幅されるためである。特に本計算例のように溶質が低濃度、つまり固相の活量係数が液相よりも大きな場合に、誤差増幅問題は深刻である。そこで、本研究では界面濃度のデータテーブルを、ケミカルポテンシャルをインデックスとし、 $c_1^L(\mu_1^L, \mu_2^L)$, $c_2^L(\mu_1^L, \mu_2^L)$, $k_1(\mu_1^L, \mu_2^L)$, $k_2(\mu_1^L, \mu_2^L)$ として構築した。これは、熱力学的な駆動力が式(6)の第3項と表されることに着想している。駆動力は各界面濃度の自由エネルギー差から、ケミカルポテンシャル分を減じることで求められる。ケミカルポテンシャルは、例えば金属間化合物などの場合、自由エネルギー形状が急峻で組成的なわずかな差異が大きな値の違いを生み出す可能性がある。また、ケミカルポテンシャルは濃度の対数項を含んでいるため低濃度または $k \ll 1$ 条件では注意が必要となる。この方法が一般的でないのは、CALPHADのデータベースが濃度の関数として提供されており、データテーブル構築には、ケミカルポテンシャルの関数として濃度を変換する必要があるためである。しかしポテンシャルをインデックスとすれば、テーブルの濃度間隔は駆動力誤差が一定以下になるよう自動調整されるため計算の数値安定性に対する寄与は大きい。

本研究では、CALPHAD法で評価された自由エネルギーを用いて、 $Mg_{97}Zn_1Y_2$ と $Mg_{97}Zn_1Gd_2$ 合金の凝固計算を行った。平衡状態図によるといずれの場合も初相は α -Mg相であり、Mg-Y-Znは第2相としてLPSO相が晶出する。LPSO相晶出の駆動力は、計算で得られた α -Mg初相凝固中の液相からLPSO相が核生成すると仮定し算出する。ここで、Mg-Gd-Zn系ではLPSO相は安定相でないため自由エネルギーが評価されていない。しかし、LPSO相はi) hcp構造を基礎とした相であり、ii)熱間加工により析出可能であることを考慮すると、LPSO相の自由エネルギーは同組成のhcp相より僅かに低いと予想することができる。また、Mg-Y-Zn系のLPSO相と同組成 α -Mg相とのエネルギー差は凝固温度付近では常に約 1000 J mol^{-1} であることから⁽⁵⁾、Mg-Gd-Zn系の場合、 α -Mg相よりも常に 1000 J mol^{-1} 小さいと仮定した。この見積もりは凝固中にLPSO相が晶出しないという事実を考慮すると、LPSO相の安定度を実際よりも高く見積もっている可能性があることに留意する。系は一定冷却するとして、計算領域は、実験値⁽⁸⁾を参考に結晶粒径が 1000 K/s で $20 \mu\text{m}$ と設定した。

3. 適用例

(1) $Mg_{97}Zn_1Y_2$ 合金の2次元凝固計算

CALPHADデータを界面濃度テーブルを通じてフェーズフィールド法と連携する方法では、平滑界面より曲率をもつ固液界面を計算する場合に数値的に不安定になる。界面進行方向は凝固に伴う溶質再分配があるため溶質濃度変化が大き

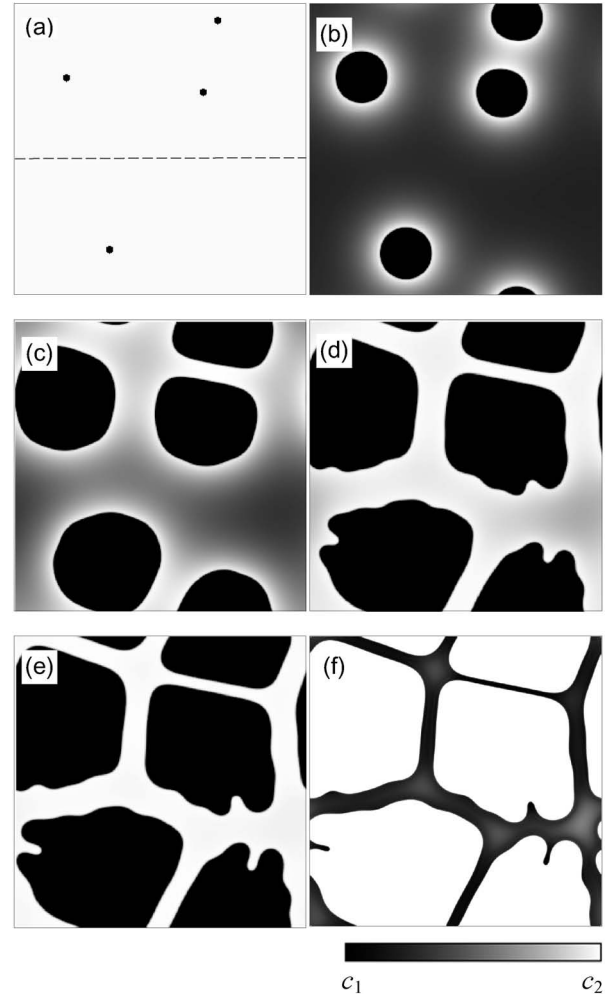
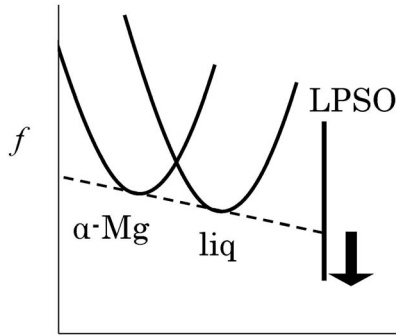


図2 Mg - Y - Zn 合金の計算結果(2D). 凝固中の濃度分布変化(a)-(e)、駆動力分布. (a)融点温度, T_m , (b) $T_m - 10$, (c) $T_m - 20$, (d) $T_m - 30$, (e) $T_m - 40$, (f) $T_m - 57 \text{ K}$ でのLPSO相の駆動力分布. (a)-(e): c_1 は2.0 at%固定; c_2 は液相中の最高濃度でそれぞれ2.1, 2.78, 3.57, 4.32, 5.02 at%. (f)は駆動力 $c_1 = 0.0$ and $c_2 = 10 \text{ J/mol}$ に対応する.

く界面濃度の誤差が計算に与え得る影響は少ない。一方で、界面の接線方向には曲率過冷や界面の異方性に由来する濃度差しか存在しないためである。

図2に $Mg_{97}Zn_1Y_2$ 系の凝固計算例(Zn濃度分布)を示す。計算領域は一辺 $40 \mu\text{m}$ の周期境界で冷却速度は 1000 K/s である。仮に本計算を濃度インデックスのテーブルを用いて行くと、インデックス間隔を 0.01 at\% (通例の $1/10$)にしても界面領域が途中で発散/不安定化してしまい、図2に示されるような計算はできなかった。一方、ケミカルポテンシャルをインデックスとした場合、データ数自体が濃度 0.1 at\% 毎よりも少なくとも安定計算が可能であった。このように、ケミカルポテンシャルをインデックスとしたデータテーブルの構築は、計算の安定性・速度向上に非常に有用であることが示された。

LPSO相の析出駆動力は次式より求められる。計算領域各



Driving force for nucleation

図3 核生成の駆動力の概念図.

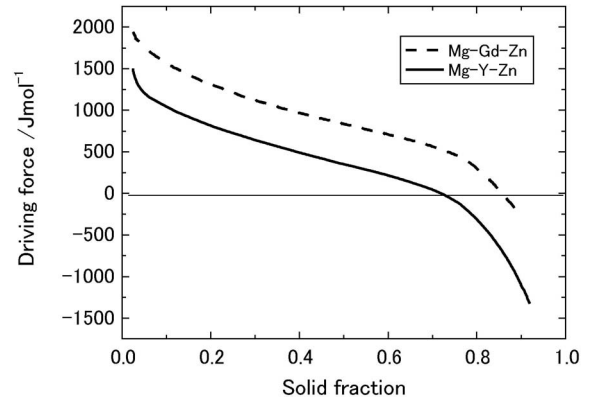


図4 LPSO相の駆動力計算.

点での液相濃度と温度を入力値とし、液相濃度から接線を引いてLPSO濃度まで外挿した値とLPSO相とのエネルギー差が駆動力となる.

$$\Delta f_{L \rightarrow LPSO} = f^{LPSO} - \{f^L(c_i^L, c_j^L) + \mu_i^L(c_i^L, c_j^L)(c_i^{LPSO} - c_i^L) + \mu_j^L(c_i^L, c_j^L)(c_j^{LPSO} - c_j^L)\},$$

$$(i = \text{Zn and } j = \text{Y}). \quad (9)$$

図3に駆動力見積りの概念図を示す. 図2(f)は、LPSO相の駆動力が負値になったときの駆動力分布図である. 濃淡が濃い部分ほどLPSO相の駆動力が大きい. 図から明らかなように、LPSO相は固液界面付近で固相間に挟まれて溶質濃化が進む領域で晶出の駆動力が大きくなっている.

以上のように化学ポテンシャルベースを用いるとCALPHAD連携計算が安定的に高速で行われた. これは低濃度、分配係数 $\ll 1$ の条件だけでなく、副格子モデルで表わされた金属間化合物相など、化学量論組成付近で化学ポテンシャルの値が急峻に変化する相の計算にも有効である. しかし、本計算の2次元計算の場合でも α -Mg固相率が0.8まで凝固が進行するまでにはIntel Itanium-9140 CPUを8並列で1週間ほど掛かる. フェーズフィールドは3次元での計算が多数行われているものの、CALPHADデータ連携を考えた場合は2次元計算であっても未だに挑戦的な課題となる⁽⁹⁾.

(2) Mg-Y-ZnとMg-Gd-Zn系における一次元凝固計算とLPSO相の駆動力計算

平均結晶粒径を計算領域長とすることでLPSO相の駆動力は一次元計算で可能となる. 図4は $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ と $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ 合金を冷却速度1000 K/sで凝固させた場合におけるLPSO相晶出駆動力変化を示す. グラフ上で負値の領域がLPSO相の晶出により系のエネルギーが下がる状態である. Mg-Y-Zn系の場合、 α -Mg相率が約0.75で正負が逆転している. ここで、実験によって得られている $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ 系のLPSO含有率も約0.75とLPSO相の熱力学駆動力の変化と一致している⁽¹⁰⁾. 核生成現象には駆動力だけではなく、異相界面の形成や結晶構造の組替えなどを考慮しなければならない. しかしLPSO相は α -Mg相と同じ

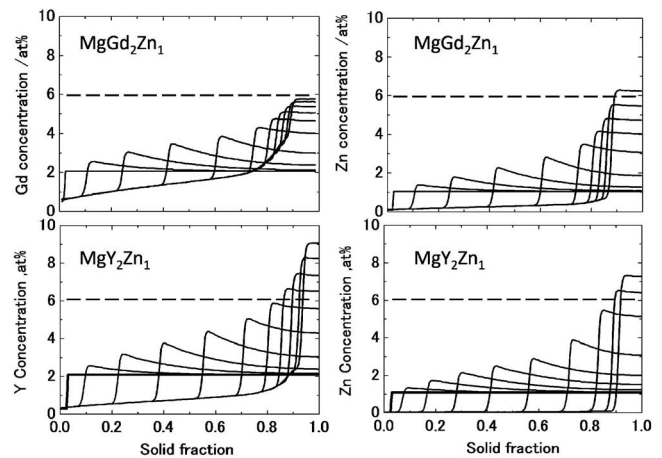


図5 凝固中の濃度分布変化. 融点から10 K毎に描画.

hcp構造をベースとしているため、結晶構造の異なる相が晶出/析出する場合よりも後者の影響は小さく、核生成がほぼ駆動力律速となり本計算と実験のLPSO相比と一致したと考えられる.

また、図4より、Type-II合金である $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ がType-I合金である $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ よりもLPSO相晶出駆動力が低く、実験報告と矛盾しない結果を得られた. また正値から負値への変化する閾値の固相率差は約15%であり、 $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ 合金が $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ 合金と比べてLPSO相が晶出しにくいとする根拠に足る有意な差であると考えられる.

次にLPSO晶出駆動力の合金間差異を生じさせた原因について考察する. 図5に α -Mg初相凝固中の濃度変化を10 K毎に示す. 冷却速度は1000 K/s一定である. 比較のため $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ 合金の最終凝固部のGd濃化濃度である約6 at%に基準線を引いた. 図5より液相中の溶質濃度は、 $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ の方が $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ 合金よりも高いことが分かる. これは $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ の溶質分配係数が $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Gd}_2$ 合金のそれよりも小さく、凝固中に輩出された溶質が液相中に高濃度に偏析するためである. LPSO相晶出(核生成)の駆動力は、図3に示した通り液相の自由エネルギーに固液界面に接する液相濃度から接線を引き、LPSO相の濃度まで外挿し

RIETAN-FP・VENUSシステムと 外部プログラムによる粉末構造解析

—3. 構造モデルの導出と電子・散乱長密度の三次元可視化—

泉 富士夫*

3・1 RIETAN-FP の出力ファイルを介した連携解析

RIETAN-FP をパターンフィッティングのエンジンとして利用し、各種プログラムとの連携を通じて様々な結晶解析に適用すれば、その存在意義が一段と高まる。RIETAN-FP は4つのアプリケーション、

1. MEP 法プログラム ALBA⁽¹⁾,
2. 未知構造解析統合システム EXPO⁽²⁾,
3. チャージフリッピング・プログラム superflip,
4. MEM プログラム Dysnomia

による結晶解析用の入力ファイルを出力するだけでなく、EXPO と Dysnomia の出力ファイルを読み込める。

ALBA と Dysnomia が VENUS システムに属するのに対し、EXPO と superflip はサードパーティー製プログラムである。EXPO はアカデミックユーザーに無償提供され、superflip はフリーソフトウェアとして公開されている。これらのソフトウェアとの連携を通じ、パターン分解後に未知構造モデルの構築(1~3)、リートベルト解析後に MPF による電子・干渉性散乱長密度の決定(4)へと移行しうる。ただし3・2(1)で述べるように、MEP 法は構造モデル構築の前処理とみなすのが妥当である。

上記4つのプログラム用入力ファイルを作成するには、RIETAN-FP用入力ファイル hoge.ins 中で整数変数のフラッグ MEP, NEXP, NCF, NMEM を1にセットすればよい。フラッグ、出力ファイル(“Output”の後)、外部プログラム

(“for”の後)は次のように対応している。

MEP=1: Output hoge.alb for ALBA.

NEXP=1: Output hoge.exp for EXPO.

NCF=1: Output hoge.inflip for superflip.

NMEM=1: Output hoge.prf and hoge.fos for Dysnomia.

以下、構造モデル構築用アプリケーション ALBA, EXPO, superflip との連携について3・2に、次に Dysnomia を使う MPF 解析について3・3に記す。

3・2 構造モデル構築用アプリケーションとの連携

(1) ALBA

MEM は多種多様な物理量に適応できるが、パターン関数

$$P(u, v, w) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)|^2 \exp[-2\pi i(hu + kv + lw)]$$

を対象とする場合、最大エントロピー・パターン(MEP)法と呼ぶ。ここで u, v, w は座標、 hkl は回折指数、 V は単位胞の体積である。構造因子 F は複素数であり、

$$F = |F| \exp(i\varphi)$$

と表せる。位相 φ は F が実軸となす偏角である。未知構造解析は位相問題を解決し、各反射の φ を求めることに他ならない。パターン関数は実測値 $|F_0|$ さえあれば計算でき、 φ が不要なため、未知構造物質の粉末回折データに適用できるという利点をもつ。

3・1で述べたように、hoge.ins 中で“MEP=1”と設定し

* 物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点 客員研究者(〒305-0047 つくば市千現 1-2-1)

Structure Analysis by Powder Diffraction with the RIETAN-FP-VENUS System and External Programs —3. Derivation of Structural Models and Three-Dimensional Visualization of Electron and Scattering-Length Densities—; Fujio Izumi (Research Center for Advanced Measurement and Characterization, National Institute for Materials Science, Tsukuba)

Keywords: powder diffraction, ab initio structural analysis, maximum entropy method, MEM-based pattern fitting, electron densities

2017年5月29日[doi:10.2320/materia.56.503]

て RIETAN マクロを実行すれば、パターン分解後に MEP 法により重畳反射の積分強度を改善できる。実際には hoge.alb を ALBA が読み込んで MEP 法で解析する。しかしバッチファイル RIETAN-FP.bat (Windows)あるいはシェルスクリプト rietan.command (macOS)中で grep, sed, tail, bc, cut などの UNIX コマンドを駆使することにより、あたかも RIETAN-FP のみでパターン分解と MEP 解析を連続実行するかのように見せかけている。すなわち RIETAN-FP の出力 hoge.lst と ALBA の出力 hoge.out を再編成し、RIETAN-FP と ALBA を実行する際の経過時間を記録した後、hoge.lst に上書きする。その結果、RIETAN-FP.bat と rietan.command はパターン分解+MEP 解析用ラッパー(wrapper)として機能する。

ここで、ALBA は MEP 法で改善した積分強度 $|F|^2$ を直接出力できる唯一の無料プログラムだということを強調しておきたい。MEP 解析は重畳反射における $|F|^2$ の改善を通じ、直接法やチャージフリッピングによる構造モデルの構築を成功に導く潜在力を秘めている。

(2) EXPO

hoge.exp では、RIETAN-FP によるパターン分解の結果を出力した hoge.ffe (MEP=0)または hoge.mep (MEP=1) のファイル名が REF2 の後ろに記録される。EXPO による Le Bail 解析では、REF2 の前に注釈マーク “>” を付けるとともに Le Bail 解析関連行の冒頭の “>” を削除する。さらに、回折強度データファイル hoge.int は EXPO 互換フォーマットで記録しなければならない。

EXPO で hoge.exp を入力した後は、ツールバー右の Next ボタンをクリックし続けるだけで一連の処理が進行していく。パターン分解で求めた $|F|^2$ から直接法で位相セット、ひいては構造モデルを決定すると、信頼度の指標 R_F の小さい順に構造モデルが Explore trials ウィンドウ内に列挙され、マウス・クリックで選択したモデルの結晶構造が

JAV(Just Another Viewer)によってグラフィック表示される。JAV はモデルの可否を一目で教えてくれることもあり、使い勝手が良い。有機分子の場合、Tools メニューで「Add Hydrogen > Automatic」を選ぶことにより水素原子を自動付加できる。

直接法は非対称単位内の原子が比較的少ない単純な構造を解くのに適している。EXPO で部分構造が得られたならば、それをフィードバックしたパターン分解も可能である。hoge.ins 中で “NMODE=5” に設定すればよい。重畳反射の初期積分強度が改善されるため、正しい解に到達する可能性が増す。

(3) Superflip

Superflip はチャージフリッピング専用プログラムである。積分強度抽出機能を欠いているため、ハイブリッド・パターン分解だけでなく最大エントロピー・パターン解析の機能も有する RIETAN-FP との連携を通じて構造モデルを導出するとよい。

hoge.inflip の末尾(fbegin と endf で囲まれたブロック)には観測反射の回折指数 hkl , 半値全幅 H , 観測積分強度 $|F_o|^2$ が記録される。行頭の注釈マーク “#” を除去・付加するとともに、個々のチャージフリッピング計算に適した設定に試行錯誤で変更した後、superflip を実行する。

チャージフリッピングのプロセスを図3.1に示す。まず乱数で一組の初期位相を発生させ、フーリエ合成で計算した電子密度(単位胞中の総 voxel 数: N)のうち閾値 δ より低い値の符号を反転する。得られた電子密度セットからフーリエ変換により φ を更新する。その際、強度の弱い反射については φ を $\pi/2$ だけシフトし、観測されていない反射の $|F|$ はゼロにするという操作を加える。収束するか、または指定したサイクル数に達するまで、上記のプロセスを繰り返す。チャージフリッピングは逆空間と実空間を行ったり来たりするため、双対空間法(dual-space method)とも呼ばれる。van der

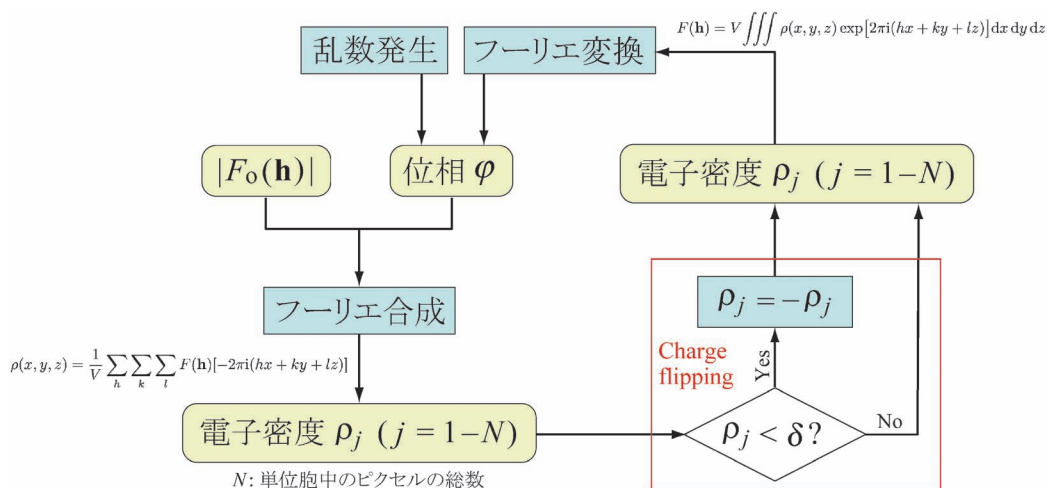


図3.1 チャージフリッピングのフローチャート。 \mathbf{h} : 回折指数 hkl 。構造因子のフーリエ合成が電子密度、電子密度のフーリエ変換が構造因子に相当する。(オンラインカラー)

Lee⁽³⁾は直接法とチャージフリッピングには、位相問題を解決し構造モデルを導出する能力に有意な差がないと指摘した。

チャージフリッピングによる構造モデル構築では、ヒストグラム・マッチング⁽⁴⁾の導入がしばしば必要となる。ヒストグラム・マッチングは一般的には、画像のコントラスト調整技法として知られている。タンパク質の解析では、密度修正法(density modification)の一種として初期位相の改良に使われる。実測データから計算された電子密度分布のヒストグラムを作り、組成や構造の似た既知構造(または理想的な構造)から導出される電子密度分布のヒストグラムと比較し、両者が大きく異なっている場合は、より現実的なものにヒストグラムを置き換える。この手続きは初期位相をしばしば改善させる。粉末回折データを用いたチャージフリッピングにヒストグラム・マッチングを導入すれば、重なった反射の積分強度をより適切に再分配できる。

フッ素アパタイトの粉末 X 線回折データを superflip で解析する場合、サイクル数や位相発生回数さえ適正ならば、MEP 法で重畳反射の $|F|^2$ を改良すると、常に正しい解に到達する。チャージフリッピング終了後に VESTA で描いた最終電子密度の等値曲面を図3.2に示す。引き続き EDMA マクロにより電子密度のピーク位置に原子を割り当ててから CIF を出力する。VESTA が当該 CIF を自動的に開くため、ただちに構造モデルの検証に移行しうる。

3.3 MPF 解析による電子・散乱長密度分布の可視化

3.3.1 リートベルト法の限界の克服

リートベルト法⁽⁵⁾は原子炉を利用する角度分散型中性子回折のために考案されて以来、X 線・放射光・飛行時間(time-of-flight)中性子回折にまで適用範囲が拡大され、広く普及している。しかしその間、本質的な進化を遂げたとは言いがたく、今や非線形最小二乗法に基づく古典的構造精密化法の感が強い。分率座標、原子変位パラメーター、占有率などの構造パラメーターでは表現し切れない不規則構造、非局在化電子の密度分布、非調和熱振動などを粉末回折データから解析

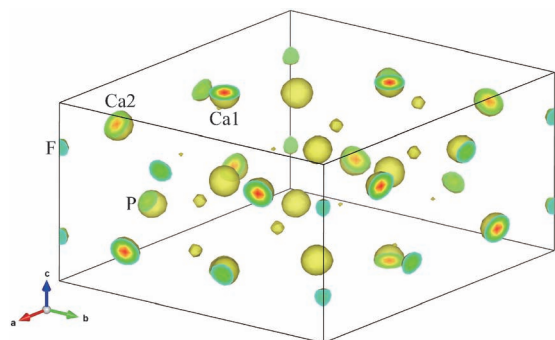


図3.2 粉末 X 線回折データのチャージフリッピング解析で決定したフッ素アパタイト中の電子密度分布。等電子密度レベル： 12 \AA^{-3} 。実在しない原子のピークがかすかに見える。(オンラインカラー)

できる先進的手法の出現が切望されていた。とくにイオン伝導体のリートベルト解析で採用する分割原子モデルは恣意的な構造精密化に堕する可能性があった。

我々は粉末回折による構造精密化の新方法論 MPF のアルゴリズムを RIETAN-2000 に導入するとともに、独自の MEM 解析プログラム PRIMA を開発することにより MPF の実用化と普及を図った⁽⁶⁾⁽⁷⁾。今では RIETAN-2000 は RIETAN-FP に、PRIMA は Dysnomia に世代交代しており、MPF の利用価値が一層高まっている。無償配付している Dysnomia が MEM の厳密解を比較的少ないメモリーで高速に求める limited-memory BFGS アルゴリズムを実装していることを誇りに思う。

3.3.2 MPFのアルゴリズム

MPF では、MEM 解析と全パターンフィッティング(whole-pattern fitting: w.p.f.)で求めた構造因子 F の相互供給を通じて結晶構造を最適化する(図3.3左)。

まずリートベルト解析後に見積もった観測構造因子 F_o (Rietveld) の MEM 解析で求めた電子・散乱長密度をフーリエ変換し、改善された構造因子 F (MEM) を計算する。VESTA で可視化した密度分布イメージが構造モデルの不十分な点を示唆しているようだったら、リートベルト解析用の構造モデルを一部変更してからリートベルト法と MEM で再解析する。以後、非の打ち所のない構造モデルに到達するまでリートベルト・MEM 解析を繰り返す。

この手法は MEM/リートベルト法(図3.3, 上の破線内)と呼ばれ、粉末回折パターンにおける隣接反射の重なり合いのために、リートベルト解析で採用した構造モデル寄りのバイアスが多少かかった電子・散乱長密度を与える。とは言い、MEM/リートベルト法は密度分布のおおまかな可視化にはそれなりに役立つ。ペロブスカイト太陽電池材料 (CH_3NH_3) PbI_3 において I^- イオンが格子間サイトを経由して移動する様が MEM/リートベルト法によって解明されたのが、その好例である⁽⁸⁾。

次に、構造因子を F (MEM) に固定し、全回折パターンを

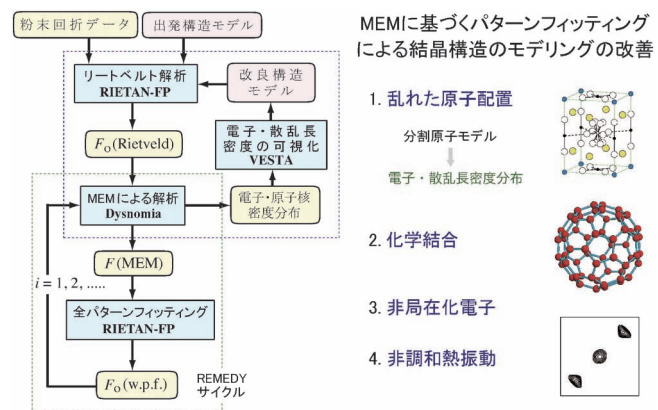


図3.3 MPF 解析のフローチャート(左)と典型的応用例(右)。(オンラインカラー)

対象として結晶構造と無関係なパラメーター、すなわち尺度因子、プロファイル・パラメーター、格子定数、バックグラウンド・パラメーターなどをリートベルト法で精密化する。その過程でMEM解析によって得た二次構造情報が粉末回折データの解析にフィードバックされる。w.p.f.終了後に、各ステップにおける観測ブラッグ反射強度を最新の F (MEM)に基づいて再分配することにより F_0 (w.p.f.)を計算する。引き続き F_0 (w.p.f.)をMEMで再解析し、 F (MEM)を求める。図3.3下の破線内に示すように、以後w.p.f.後の R_{wp} がもはや減少しなくなるまでw.p.f.とMEM解析を交互に繰り返す(REMEDYサイクル)。

REMEDYサイクルでは、通常、MPFで得た解析結果を精査して $|F_0|$ の誤差 $\sigma(|F_0|)$ を調節する。MEMでは観測・計算構造因子の差が能う限り $\sigma(|F_0|)$ の範囲に収まるような密度分布を求めるため、 $\sigma(|F_0|)$ の値が大なり小なり解析結果に影響する。尺度因子 s の誤差を無視すれば、誤差の伝播則に基づき $\sigma(|F_0|)$ は

$$\sigma(|F_0|) = \frac{|F_0|}{2} \sqrt{\frac{1}{EI_0}}$$

と表せる⁹⁾。ここで E は誤差調整因子、 I_0 は観測積分強度を示す。hoge.lst中のE(SCIO)が E の標準値に相当する。

信頼度の指標は第1サイクルでとりわけ顕著に低下するが、積分強度から算出する R_B と R_F がとくに激減し、第2サイクル以降も減少し続ける。密度分布に及ぼす構造モデルの影響はREMEDYサイクルが進むにつれ、急激に薄れていく。その過程で密度分布が感知できる程度に変化するの言うまでもない。MEMで得た構造情報を取り込んだw.p.f.を反復すれば、重畳反射における観測回折強度の分配はもとより、結晶構造と無関係な尺度因子やプロファイル・パラメーターなども改善される。

MPFの独創性は、構造因子の改善をMEMに任せ、結晶構造と無関係なパラメーターだけをw.p.f.で精密化することにある。w.p.f.への F (MEM)のフィードバックは、MEMによるartifactの生成に歯止めを掛けることに直結する。言わば幻想から現実の世界へと引き戻してくれるのである。MPFはMEMの助けを借りて粉末回折データに含まれる構造情報を最大限に抽出できるという点で、リートベルト法を凌駕している。MPFは単位胞中の電子(X線)あるいは散乱長(中性子)の密度により実質的に結晶構造を表現する。したがって、イオン伝導体中の可動イオンのような不規則な配置をとる化学種の空間分布や非調和熱振動をX線・中性子回折により決定し、X線回折データから化学結合を視覚化するのによってつけである(図3.3右)。

3・3・3 MPF解析の自動化

REMEDYサイクルには煩雑なファイル処理と反復計算が必要不可欠である。そこで、hoge.prf中で指定した通りに E を変えながら複数組のMPF解析を自動的に実行するための

シェルスクリプトMPF_multi.commandを作成した。 E を順次5500, 5700, 5900と変えて $\sigma(|F_0|)$ を調節する場合の手順が図3.4である。前述のように、DysnomiaによるMEM解析とRIETAN-FPによるw.p.f.を繰り返すことにより、リートベルト解析における構造モデル寄りのバイアスを最小化する。MPF_multi.commandがUNIXベースのmacOSだけでなくWindows上でも動くことは特筆に値する。

hoge.prfとhoge.fosのペアはMPF_multi.commandの入力ファイルとなる。言い換えればRIETAN-FP・VENUS支援環境用マクロ以外で処理されるファイルである点が3・2で述べた三つのプログラムの入力ファイルと異なる。

hoge.insで“NMEM=1”に設定すると、利便性の向上と省力化を図るためにDysnomia用入力ファイルhoge.prfに加えMPF_multi.commandもカレントフォルダーに自動生成する。そしてMPF_multi.commandのアイコンをダブルクリックするだけでMPF解析が始まる。支援環境外で解析するのは、計算中にエディターを使おうとするとマクロを停止せざるを得なくなるためである。

なおhoge.prfがカレントフォルダーに存在する場合、RIETAN-FPはhoge.prfを上書きしないという仕様になっている。既存のhoge.prfを使い続けたいというケースが多いことを考慮したためである。hoge.prfを更新したいときは、RIETAN-FP実行前にhoge.prfを削除しなければならない。

MPF解析終了後に、そのログファイルhoge.logがカレントフォルダーに生成するため、それをエディターで閲覧するだけで、複数のREMEDYサイクルにおける信頼度指標の変化が見渡せる。また、異なる E 値に対応するフォルダーの下に各サイクルのサブフォルダーが生成し、そこに当該サイクルにおけるMEM解析とw.p.f.の入出力ファイルが格納される。密度分布のvoxelデータはバイナリーファイルhoge.pgridに保存され、VESTAで可視化できる。

一般に有機化合物(錯体)中の結合は共有結合性が高く、化学結合に寄与する電子の割合が大きい。したがって有機化合物では、実質的に単位胞中の電子密度で結晶構造を表現するMPF解析による信頼度指標の改善が著しく、電子密度分布

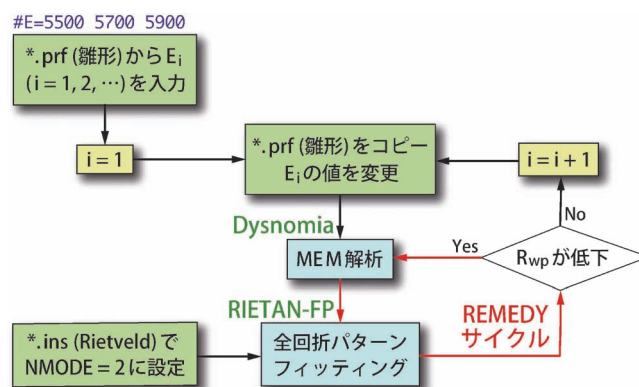


図3.4 シェルスクリプトMPF_multi.commandを用いるMPF解析のフローチャート。(オンラインカラー)

[†] 厳密には「誤差」は「不確かさ」とすべきである。

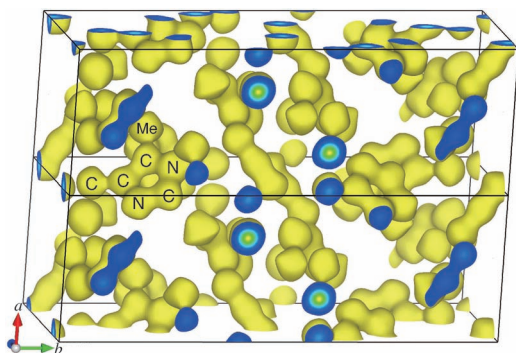


図3.5 放射光粉末 X 線回折データの MPF 解析で決定した cimetidine の電子密度分布. 等電子密度レベル: 1.11 \AA^{-3} . a 軸に沿って単斜単位胞を二つ積み重ねて表示している. (オンラインカラー)

イメージの見栄えも良くなる. Cimetidine のシンクロトロン X 線回折データを MPF で解析して得られた等電子密度曲面を図3.5に示す. 少なくとも一部が青い平面は単位胞のエッジにおける断面である. C(S 原子と結合)-イミダゾール環-メチル基(Me)の C-C と C-N 結合が視覚化されており, H 原子に由来する「出っ張り」が C 原子の曲面に現れているのは感動的である. この等値曲面レベルではゴーストピークは見当たらない.

3・4 粉末構造解析の教材を目指して

紙面の限られた本講座に加え書籍⁽¹⁰⁾, レビュー(Web ページ⁽¹¹⁾)に列挙), マニュアルなども読み, いくら講演や講義を聴講したところで, 高度な解析技術がおのずと身に付くわけではない. 粉末回折に限った話でないが, 活字や一方通行の講義を通じて学んだ知識はなかなか血肉と化さないのである.

筆者は人材育成事業の短期講習や自主開催している無料講習会では, 講義よりはむしろ PC を使う実習を重視している. 実習の目的が座学の補完なのは言うまでもない. RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムを自らインストールした後, それらを順次実行していき, 実戦経験を積むことにより粉末構造解析についての土地勘を養う.

ハンズオンで使用するプログラムはかなり多く, しかも目まぐるしく変わるため, 必要に応じてメモをとるのも煩わしい. そこで実習の円滑な進行を図るとともに, その内容に遺漏がないように Windows・macOS 上での操作手順を100ページ超にわたり懇切丁寧に記述したチュートリアルをインストーラーに同梱している. 後日, 印刷したチュートリアルを眺めながら, 復習するのもすこぶる役立つ.

チュートリアル中には近年筆者が書きためてきたブログ・エントリーや Evernote の公開ノートへのリンクが多数張られているため, 貴重な付加的情報も得られる. この文書の入手だけでも収穫が大きいため, 実習付き講習会への参加を強く勧めたい. 要請さえあれば, 喜んで大学などに無料講習会を出前する用意がある.

多種多様なプログラムからなるインストーラー, 計700ページになんなんとする RIETAN-FP・VENUS システムのマニュアル, チュートリアルが渾然一体となった当該コンテンツを通じて多くの方々が粉末構造解析に関する知識と経験を深め, 種々の材料に応用し, 有用な成果を得たならば, これに過ぎる喜びはない. 本入門講座はその当該コンテンツの一部として, 単なる連載記事を超越した存在となることを願いつつ執筆したことを最後に申し添えておく. (完)

文 献

- (1) 泉 富士夫: 実験化学講座11, 物質の構造 III 回折, 第5版, 日本化学会編, (2006), 4章.
- (2) A. Altomare, C. Cuocci, C. Giacovazzo, A. Moliterni, R. Rizzi, N. Corriero and A. Falcicchio: *J. Appl. Crystallogr.*, **46** (2013), 1231-1235.
- (3) A. van der Lee: *J. Appl. Crystallogr.*, **46** (2013), 1306-1315.
- (4) C. Baerlocher, L. B. McCusker and L. Palatinus: *Z. Kristallogr.*, **222** (2007), 47-53.
- (5) H. M. Rietveld: *J. Appl. Crystallogr.*, **2** (1969), 65-71.
- (6) F. Izumi: *Solid State Ionics*, **172** (2004), 1-6.
- (7) F. Izumi: *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **111** (2003), 617-623.
- (8) J. L. Minns, P. Zajdel, D. Chernyshov, W. van Beek and M. A. Green: *Nat. Commun.*, **8** (2017), No. 15152.
- (9) 泉 富士夫: *RADIOISOTOPES*, **59** (2010), 191-200.
- (10) 中井 泉, 泉 富士夫編著: 粉末 X 線解析の実際, 第2版, 朝倉書店, (2009).
- (11) <http://fujioizumi.verse.jp/download/download.html>

高活性な白金ナノ粒子触媒の開発と 電極触媒としての応用展開

白仁田 沙代子*

1. はじめに

一般的に安定であると言われている Pt は、その特性のため総需要量の32.5%が宝飾品用として使われている⁽¹⁾。その一方で、粒子サイズを小さくしていくと表面特性が変化し、触媒として高い活性を有することから、自動車用排気ガス浄化触媒としては宝飾品用を超える37.1%という高い割合を占めている。その他、化成品や医薬品の中間体、農薬合成などの産業用が21.3%を占めている⁽¹⁾。

この Pt を触媒として使用するには、Pt の比表面積が大きくなるようにナノ粒子化される。これまでに様々なナノ粒子に関する研究は多くなされている⁽²⁾。特に、Pt は上述した通り、高価かつ希少であるため、活性な Pt 金属表面の有効利用、Pt 使用量の削減技術の開発が必要不可欠である。そこで、Pt ナノ粒子を高分散状態で担持すること、低 Pt 量でも活性があることを目指し、紫外光にアクティブな担体材料を用いて Pt ナノ粒子を固定化し、さらに電極触媒としての展開を試みたので紹介する。

2. 単核 Ti 種上への Pt ナノ粒子の固定化

ここで紹介するのは、図 1 に示す Si 骨格で構成されるメソポーラスシリカ内に Ti 種を組み込んだ Ti 含有メソポーラスシリカ上に Pt ナノ粒子を固定化担持する手法である⁽³⁾⁽⁴⁾。ここで、Ti 種は単核でメソポーラスシリカの骨格内に組み込まれるよう Ti/Si が0.01の割合になるように調製し、規則的な細孔構造を有していることを XRD 測定により $2\theta = 2^\circ$ 付近にピークが観測されることで確認している。この

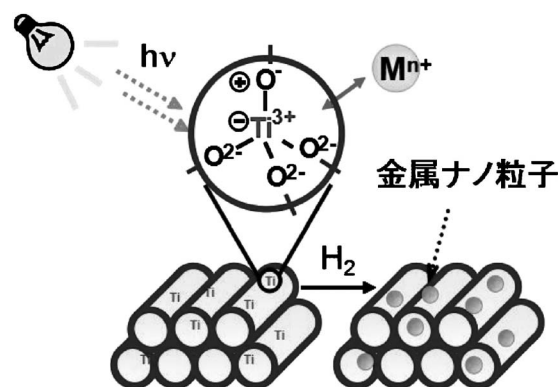


図 1 紫外光照射下における Ti 含有メソポーラスシリカ上への Pt ナノ粒子担持の概略図。

単核 Ti 種は紫外光照射下で、バルクの TiO_2 とは異なる励起種を生成する。バルクの TiO_2 に紫外光を照射すると、電子と正孔はそれぞれ空間的に離れたサイトに生成し、それぞれ還元反応と酸化反応に寄与する。一方、孤立した単核 Ti 種では、 $(\text{Ti}^{3+}-\text{O}^-)$ などの電荷移動型励起種を形成し、電子トラップサイト (Ti^{3+}) と正孔トラップサイト (O^-) が隣接した共存状態で反応に寄与する⁽⁵⁾。そのため、バルクとは異なる反応活性や反応選択性を示すことが知られている。また、この Ti 種は高分散状態で存在しており、Pt の固定化を Ti 種上で行うと Pt ナノ粒子も高分散状態で固定化されることが期待される。

まず、Ti 含有メソポーラスシリカの調製方法であるが、Ti 源にチタンテトライソプロポキシド、Si 源にオルトケイ酸テトラエチル、構造規制剤にドデシルアミンを用い加水分解

* 長岡技術科学大学大学院工学研究科；助教(〒940-2188 長岡市上富岡町1603-1)
Development of High Active Pt Nanoparticle and Its Application as Electrocatalyst; Sayoko Shironita (Nagaoka University of Technology, Nagaoka)
Keywords: *platinum, catalyst, nano particle, electrocatalyst*
2017年3月24日受理[doi:10.2320/materia.56.508]

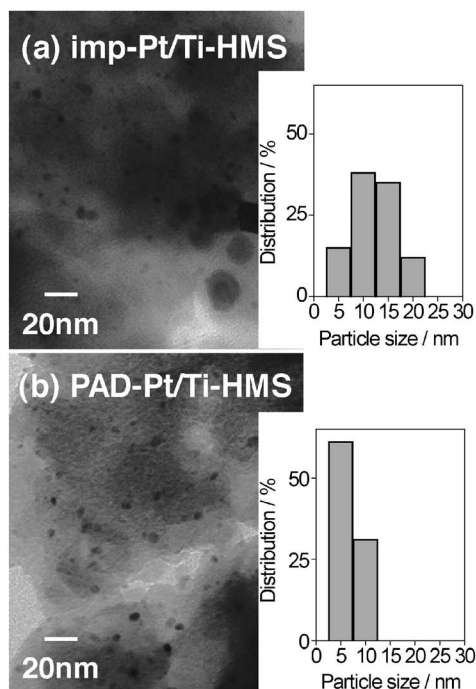


図2 (a)含浸法で調製した触媒(imp-Pt/Ti-HMS)と(b)紫外光照射下で調製した触媒(PAD-Pt/Ti-HMS)のTEM写真とPt粒子径のヒストグラム。

解反応により得られた沈殿物をろ過・乾燥・焼成した⁽⁶⁾。その後、Ptを含有する前駆体(H_2PtCl_6)水溶液中に調製したTi含有メソポーラスシリカ粉末を分散させ100 Wの高圧水銀ランプを用い、298 K紫外光照射下で攪拌するという簡易な方法(光支援析出法: PAD法)でPtナノ粒子を固定化担持した⁽³⁾⁽⁴⁾。

比較のために含浸法(imp)においてもPt粒子をTi含有メソポーラスシリカ上に担持した。Pt前駆体水溶液とTi含有メソポーラスシリカ粉末を混合し、減圧下で蒸発乾固させた。その後、383 Kで乾燥させ、水素流通(20 mL/min)下473 Kで1時間還元処理を行った。

これらの手法で調製したPtナノ粒子のTEM写真と写真より算出したPt粒子径のヒストグラムを図2にそれぞれ示す。含浸法で調製した方はPt粒子径が2-20 nmの粒子径を有しており、粒径分布が広がっていることがわかる。一方、紫外光照射下で調製したPt粒子は4 nm付近に狭い粒子径分布を有していることがわかる。粒子も高分散状態で固定化されている様子が見てとれる。

ここでこれらの調製したPtナノ粒子担持触媒を用いてCO酸化反応により触媒活性を評価した。条件は、触媒0.1 g、COガス濃度1%、バランスガスは空気とし、30 mL/minで流通させた。その結果を図3に示す。紫外光照射下で調製した触媒は、約400 Kで転化率100%に達している。一方、含浸法の触媒は反応を進める上でより高温で反応させる必要があることがわかる。よって、このCO酸化反応においてPt粒子の粒子径と分散度が重要であることがわかった。

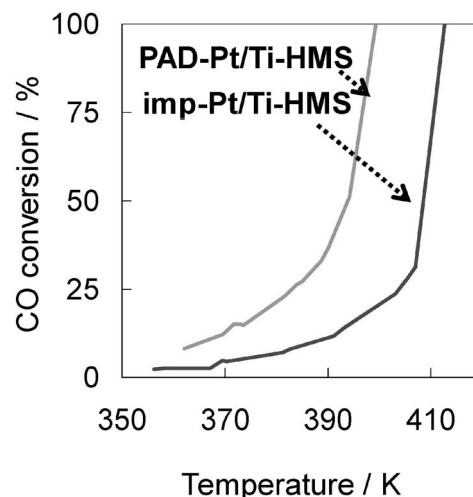


図3 含浸法で調製した触媒(imp-Pt/Ti-HMS)と紫外光照射下で調製した触媒(PAD-Pt/Ti-HMS)のCO酸化反応。

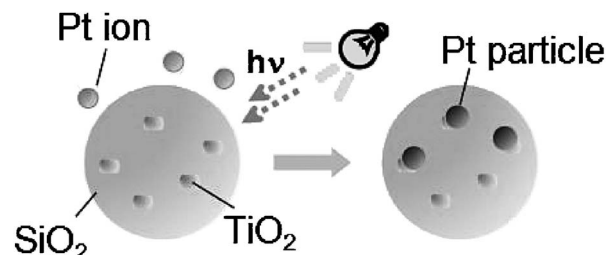


図4 紫外光照射下における TiO_2 - SiO_2 担体材料へのPtナノ粒子担持の概略図。

3. 燃料電池用の電極触媒のPt使用量削減

排気ガス浄化の自動車触媒以外にも、近年注目されているのは燃料電池用の電極触媒である。これにもPtナノ粒子は使用されている。併せて、このPt使用量の低減が燃料電池自体のコスト削減および本格的な普及に大きく関わってくると言っても過言ではない。希少金属であるPtの有効利用は世界的にも重要な課題でもある。そこで、上述の触媒調製法を電極触媒に応用展開し、図4に示すようにPt粒子の担持サイトを制御した系の電極触媒の作製を試みた⁽⁷⁾。

ここでは TiO_2 と SiO_2 の混合粒子(TiO_2 - SiO_2)を担体材料として用いた。Si源にはオルトケイ酸テトラエチル、Ti源にはチタンテトライソプロポキシドを用いた。 TiO_2 の含有量が5, 10, 50 mass%になるように加水分解法により303 Kで3時間攪拌し、ろ過後に乾燥させ、673 Kで30分間の焼成を行い TiO_2 - SiO_2 粉体とした。その後、Pt担持量が1 mass%となるようにPt前駆体(H_2PtCl_6)水溶液へ得られた TiO_2 - SiO_2 粉体を分散させ、紫外光照射下で5時間攪拌し、その後、ろ過・乾燥を行いPt/ TiO_2 - SiO_2 電極触媒とした。

得られた電極触媒は、粉体触媒を電気化学的に評価可能な多孔質マイクロ電極⁽⁸⁾に充填させ、電気化学測定を行った。

触媒を充填した多孔質マイクロ電極を作用極とし、対極には Pt コイル、参照極には Ag/Ag₂SO₄ を用いた三電極セルにて評価した。電解液には 0.5 mol/dm³ H₂SO₄ 水溶液を用いた。

図 5 に不活性ガス(Ar)雰囲気下での電流—電位曲線を示す。比較のために市販の Pt 担持カーボン(Pt/C)粉体触媒のものも示す。Pt/C の曲線はバルクの Pt に特徴的なプロトンの吸着と脱離に由来するバタフライパターンが観測されている⁹⁾。一方、今回の Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 5, 10, 50 mass%) のいずれの電極触媒において Pt の特徴は得られて

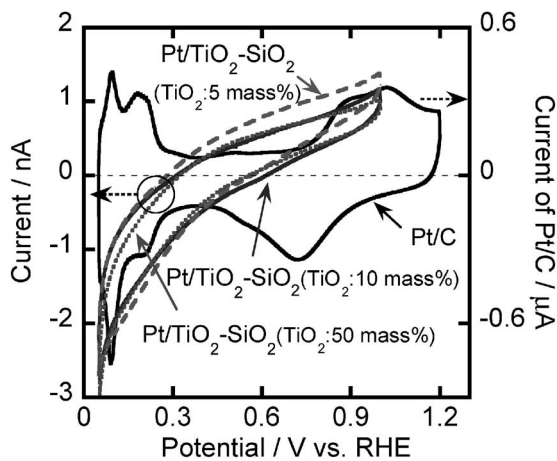


図 5 Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂:5, 10, 50 mass%) と Pt/C 電極触媒の電流—電位曲線。

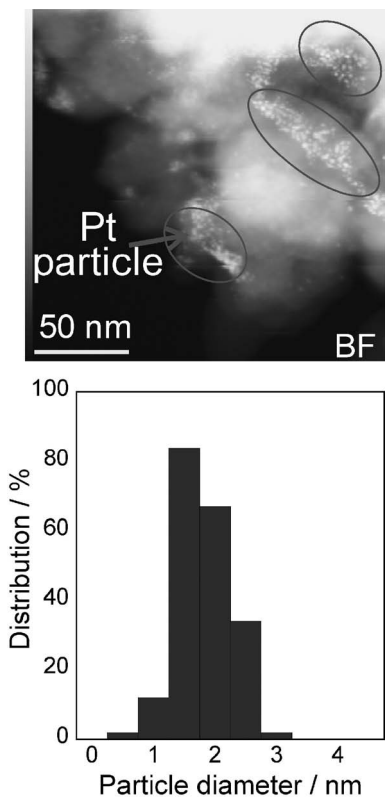


図 6 Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 10 mass%) の TEM 写真(上図)と Pt 粒子径のヒストグラム(下図)。

いない。つまり電流—電位曲線からは Pt ナノ粒子の担持の有無は確認できないことがわかる。これは担持量が少ないまたは Pt 粒子径が小さいためであると考えられる。そこで、TEM 観察および EDS 分析を行い、Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 10 mass%) の結果を図 6 に示す。小さな斑点部分とそれ以外の部分で、EDS 分析を行ったところ、斑点部分には Pt, Ti, Si, O の信号強度が、それ以外の部分では Ti, Si, O のみが検出され、確かに Pt が担持されていることが確認できた。また TEM 写真より Pt 粒子径を算出したところ 1.5 nm に平均粒径と非常に狭い粒径分布を有するヒストグラムが得られた。

次に、電極触媒の評価として燃料電池のアノード反応である水素酸化反応を行った。電解液には H₂ 飽和 0.5 mol/dm³ H₂SO₄ 水溶液を用い、作用極には、それぞれ Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂:5, 10, 50 mass%) を多孔質マイクロ電極に充填させたものを使用した。その結果を図 7 の挿入図に示す。いずれの電極触媒においても酸化電流が観測されていることがわかる。中でも、Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 10 mass%) が一番多く電

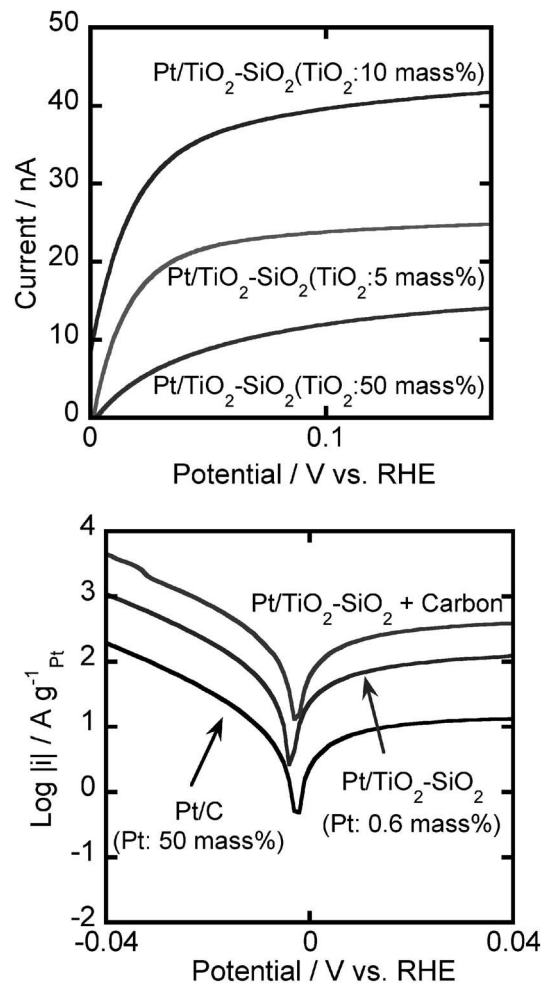


図 7 Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂:5, 10, 50 mass%) の水素酸化反応の電流—電位曲線(上図)と Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 10 mass%) と Pt/C および Pt/TiO₂-SiO₂ (TiO₂: 10 mass%) + カーボンブラックの電流—電位曲線(下図)。

流が流れている。この触媒の Pt 担持量は ICP 分析により 0.6 mass% であることがわかった。そこで、市販の Pt/C と Pt 量 1 g 当たりで比較したところ図 7 より今回作製した電極触媒の方が多くの電流が流れていることがわかった。また、担持材料の導電性がカーボンブラックと比較すると劣るため、Pt/TiO₂-SiO₂(TiO₂:10 mass%) 粉末にカーボンブラックを物理的に添加し混合したものも水素酸化反応を行った。その結果、カーボンブラックを添加しないものよりもさらに高い電流を示すことがわかった。

4. お わ り に

今回、Pt ナノ粒子の簡易な担持手法と、電極触媒としての展開の可能性を報告した。さらなる研究展開としては繰り返し使用における寿命や耐久特性も重要である。また、高導電性を有する担体材料の開発、および安定性も必要である。限りある資源を有効に活用し、よりよい持続的可能なエネルギー社会への貢献につながる研究活動を続けていきたい。

最後に本稿で紹介した研究を遂行するにあたり、大阪大学大学院工学研究科の山下弘巳教授、森浩亮准教授、大阪府立大学21世紀科学研究機構ナノ科学・材料研究センターの亀川孝特別講師の御指導、御助言を賜りました。また、長岡技術科学大学大学院工学研究科の梅田実教授の御指導、御助言および研究室学生のご協力を賜りました。ここに深く感謝の意を表します。

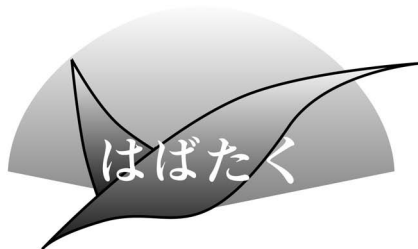
文 献

- (1) A. Cowley: Platinum 2013 Interim Review, Johnson Matthey, (2013).
- (2) R. M. Rioux, H. Song, P. Yang and G. A. Somorjai: Metal Nanoclusters in Catalysis and Materials Science: The Issue of Size Control, Elsevier, (2008), 149-166.
- (3) S. Shironita, K. Mori, T. Shimizu, T. Ohmichi, N. Mimura and H. Yamashita: Appl. Surf. Sci., **254**(2008), 7604-7607.
- (4) S. Shironita, K. Mori, T. Ohmichi, E. Taguchi, H. Mori and H. Yamashita: J. Nanosci. Nanotechnol., **9**(2009), 557-561.
- (5) H. Yamashita and K. Mori: Chem. Lett., **36**(2007), 348-353.
- (6) H. Yamashita, K. Ikeue, T. Takewaki and M. Anpo: Topics in Catal., **18**(2002), 95-100.
- (7) W. Zhang, S. Shironita and M. Umeda: Catal. Lett., **144**(2014), 112-116.
- (8) M. Umeda, M. Kokubo, M. Mohamedi and I. Uchida: Electrochim. Acta, **48**(2003), 1367-1374.
- (9) A. J. Bard and L. R. Faulkner: Electrochemical Methods: Fundamentals and Application, Wiley, (2000).



白仁田沙代子

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2009年 4月 日本学術振興会特別研究員
2009年 9月 大阪大学大学院工学研究科博士後期課程
修了
2010年 4月- 現職
専門分野: 電気化学, 触媒化学
◎高活性な金属表面を確保するための金属ナノ粒子化
技術の開発と金属表面の劣化機構解明に従事。レア
メタルの省資源化および水素エネルギー社会構築へ
の貢献を目指した研究活動。
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



博士として生きること

弘前大学大学院理工学研究科；助教
峯田才寛

1. はじめに

私は2017年3月に北海道大学大学院工学院材料科学専攻にて博士(工学)の学位を取得後、弘前大学大学院理工学研究科機械科学科において助教を拝命し、研究・教育活動に従事しております。この度は「はばたく」へ寄稿する貴重な機会を頂きましたので、僭越ながらこれまでの研究及びこれから博士として生きるにあたっての考えを述べさせていただきます。

2. これまでの研究活動

これは小・中学校の教科書にも記載される内容となりますが、金属材料は展延性・金属光沢・高電気伝導性等の様々な性質を示します。その中で学部4年時の私は、「金属材料の最たる特徴は強くそして伸びることにある」という考えに至り、金属材料の強度・変形を研究している三浦誠司教授(当時は准教授)がおられる強度システム設計研究室(当時は材料数理学研究室)に配属を希望いたしました。研究室では、Mg合金における塑性変形挙動を実験・理論の両側面から解き明かしていく研究に着手いたしました。Mg合金は実用構造材料の中で最も低比重であり、次世代を担う軽量材料として注目されています。しかしながら、Mg合金は他の軽量材料に比べ常温延性が乏しく、それ故広く普及が進んでいないのが現状であります。Mg合金における常温延性の乏しさは各塑性変形機構(底面すべり、柱面すべり、錘面すべり及び変形双晶)の相対的な活動性が著しく異なる塑性異方性に起因すると考えられております。私はMg合金の中でも優れた常温延性を示すMg-Y合金の塑性変形挙動を理解するため、種々の塑性変形機構における臨界分解せん断応力(CRSS)の合金組成依存性を単結晶を用いて実験的に調査しました⁽¹⁾。その中で、Y添加による固溶強化、及び軟化の傾向が塑性変形機構ごとに大きく異なることを明らかとし、結果としてY添加により各塑性変形機構間のCRSS比が1に近づくことがわかりました。また、CRSSを用いたvon Misesの条件に基づく数値解析から、Y添加が塑性異方性の緩和に有効であり、これがMg-Y合金における常温延性改善の要因であると解明しました。その他、インデンテーション中における材料の変形挙動をその場観察することが可能な

顕微インデンテーション法⁽²⁾を開発し、単軸の機械試験より更に複雑な変形状況下におけるMg合金の変形挙動を実験的に調査しました。

上記研究活動の中で、修士1年時に日本金属学会で最初の講演を行う機会をいただきました。その際に「学会とはなんと面白く、高い次元で議論が交わされる場であろう」と感じ、自分も同じ言語で議論に加わりたと思ったことが博士課程へ進む大きな要因となりました。その場で得られた経験、議論は今の研究活動における礎の一つとなっていると感じます。また、私のこれまでで行ってきた研究は未だ不明な点が多いMgの変形挙動をその素課程から解き明かす基礎研究に当たりますが、学会や論文で成果を報告する度に尊敬する研究者の皆様から「面白い研究だ」という言葉を頂けてきたことが、私の中で大きな活力となっていたと思います。

3. 現在の研究活動

現在、私は弘前大学の佐藤裕之教授の下で、より広い意味での「材料の変形挙動」を解明するための研究に従事しております。直近で実施している研究として、塑性加工と熱処理を組み合わせることで材料に結晶粒径が変調した組織を付与し、常温及び高温での機械特性を同時改善する組織制御法を模索しております。Hall-Petchの関係で知られますように、一般的に材料の常温強度は結晶粒径を微細化させることで向上します。しかしその一方で、結晶粒の微細化は高温でのクリープ速度の増大をもたらすことが多く、異なる温度での機械特性を同時に高いレベルで改善するためには、高度な組織制御が必要となります。また当研究室では、上記研究の他にも焼結等による組織制御法の確立を研究しており、その分野の素人ながらもこれまでに培った知識・経験を上手く応用して新たな材料科学の世界を広げていきたいと思っております。

4. おわりに

博士号を取得し研究者として生きようと思った際に、多くの方から貴重なご意見を頂くことができました。話を聞く限り、研究者を取り巻く状況は徐々に変化していることを感じ、少なくとも私は博士として生きることが世に言われるほど悪いものではないと考えております。私の第一の師である三浦誠司先生、毛利哲夫先生、池田賢一先生には、研究のみならず非常に多くのことを教えていただき、深謝いたしております。博士号の学位を取得した際に、三浦誠司先生より「小さな、しかし本質的な疑問を持ち続けるように」との言葉を頂きました。これからもその言葉を私の研究指針の一つとしながら、研究者として、また教育者として科学を探究していける存在となれるよう精進を重ねていく所存であります。

文 献

- (1) 峯田才寛, 三浦誠司, 向井敏司, 上田幹人, 毛利哲夫: 日本金属学会誌, **77**(2013) 466-472.
- (2) 峯田才寛, 三浦誠司, 岡 和彦, 宮島達也: 日本金属学会誌, **81**(2017) 196-205.
(2017年6月28日受理)[doi:10.2320/materia.56.512]
(連絡先: 〒036-8561 弘前市文京町3)

本 会 記 事

会 告 2017年秋期(第161回)講演大会ご案内と参加申込について	513
2017年秋期講演大会冊子プログラム配布方法変更	514
秋期講演大会特別企画シンポジウム開催のお知らせ	514
第4回ランチョンセミナー開催のお知らせ	516
第7回女性会員のつどいご案内	516
平成29年度秋季 全国大学材料関係教室協議会講演会	516
男女共同参画委員会10周年記念シンポジウム	517
第15回 World Materials Day Award 募集	517
2017年秋期講演大会託児室設置のお知らせ	518
2018年春期講演大会公募シンポジウムテーマ提案募集	518
「研究会」新規・更新申請募集	518
電子ジャーナル機関購読のご案内	518
永年会員制度について	518
第41回技術開発賞募集	519
第68回金属組織写真賞作品募集	520
掲示板	521
新入会員	525
会誌・欧文誌8号目次	523
行事カレンダー	527
次号予告	524

事務局 渉外・国際関係 : secgnl@jim.or.jp
 会員サービス全般 : account@jim.or.jp
 会費・各種支払 : member@jim.or.jp
 刊行物申込み : ordering@jim.or.jp
 セミナー・シンポジウム参加申込み : meeting@jim.or.jp
 講演大会 : annualm@jim.or.jp
 総務・各種賞 : gaffair@jim.or.jp
 学術情報サービス全般 : secgnl@jim.or.jp
 分科会 : stevent@jim.or.jp
 まてりあ・広告 : materia@jim.or.jp
 会誌・欧文誌 : editjt@jim.or.jp

公益社団法人日本金属学会
 〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32
 TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312
<http://jim.or.jp/>

・会告原稿締切：毎月1日で、翌月号掲載です。
 ・掲示板や行事のご案内は、ホームページにも掲載しております。

- ・ご連絡先住所変更等の手続きは、本会ホームページ [\[会員マイページ\]](#) からできます。
- ・オンラインジャーナルの発行や行事のご案内等の本会からのお知らせ E-mail の受信をご希望される方は、本会ホームページの [\[会員マイページ\]](#) → [\[会員情報の変更届\]](#) にて手続きして下さい。

会 告 (ホームページもご参照下さい)

2017年秋期(第161回)講演大会ご案内ならびに参加申込みについて

会 期：2017年9月6日(水)～9月8日(金)
 会 場：北海道大学(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)
 懇親会：2017年9月6日(水)18:00～20:00
 懇親会会場：キリンビール園本館中島公園店
 (〒064-0810 札幌市中央区南十条西1-1-60 ☎ 011-533-3000：地下鉄南北線(札幌・真駒内方面)中島公園駅 1番出口徒歩2分)
 大会参加予約申込締切：2017年8月7日(月) 参加申込みは、すべてインターネット申込となります。詳細は、下記をご覧ください。

参加申込要領

インターネットによる事前の大会参加申込みおよび懇親会参加の申込み：〈登録期間〉5月10日(水)13:00～8月7日(月)17:00

大会参加申込み URL <http://www.jim.or.jp/convention/2017autumn/>

DVDの発行(8月23日)後、予約申込者へ大会参加証引換券、概要集DVDを送付します。懇親会参加申込をされた方には、懇親会参加券もあわせてお送りします。なお、領収書は、決済完了後に申込画面から各自印刷下さい(WEB画面：講演大会 MyPage よりダウンロード)。8月8日以降は当日申込となります。当日申込をご希望の方は、会場受付にて直接お申込下さい。

◆大会参加費(講演概要集DVD代含む) ※年会費とは異なります。

参加費・講演概要集DVD・懇親会の消費税抜については、ホームページ(一覧表PDF)をご参照下さい。

予約申込締切日	8月7日(月)(申込および入金期日)	
	予約申込(インターネット申込・事前支払い)	当日申込(大会会場受付・現金払いのみ)
会員資格		
正員・維持員会社社員	9,000円	10,000円
学生会員	6,000円	6,500円
非会員 一般	19,000円	20,000円
非会員 学生(大学院生含む)	14,000円	15,000円

・お支払後の取消は、ご返金いたしかねますのでご了承下さい。

◆懇親会費(消費税込み)

予約申込締切日 種 別	8月7日(月)(申込および入金期日)	
	予約申込(インターネット申込・事前支払い)	当日申込(懇親会会場受付・現金払いのみ)
一般	5,000円	6,000円
学生	3,500円	4,000円
同伴者(ご夫人またはご主人)	3,500円	4,000円

・お席数に限りがございますので、お早目にお申込み下さい。 ・お支払後の取消は、ご返金いたしかねますのでご了承下さい。

◆支払方法

クレジットカードおよびコンビニ振込決済をご利用頂けます。また、入金後のご返金は致しかねます。8月7日(月)の入金日をもって予約申込完了となります。

◆講演概要集 DVDのみ購入する場合

件名を「2017年秋期講演大会講演概要集 DVD 購入申込」とし、①申込者氏名 ②会員資格(会員番号も併記) ③申込数 ④送付先住所をご記入の上、E-mail: ordering@jim.or.jp 宛にお申込み下さい。8月23日の発行後、請求書を添えて送付いたします。

会員価：本体3,810円+税 定価：本体10,000円+税 送料：360円

◆参加申込・問合せ

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312 E-mail: annualm@jim.or.jp

2017年講演大会冊子プログラム配布方法変更のお知らせ(会報付録なし)

講演大会のプログラムは、8月下旬冊子プログラム(PDF版)をホームページに掲載予定です。(今回、会報9月号での付録冊子プログラムはございませんのでご了承下さい。尚、講演大会参加申込事前予約者の方には講演概要集DVDとともに冊子プログラムを送付いたします)。

2017年秋期講演大会 企画シンポジウム開催のお知らせ

2017年秋期講演大会において以下の特別企画を開催いたします。

企画シンポジウム 2017年度科学研究費補助金申請勉強会

科研費の最近の動向や変更点の解説、科研費獲得に向けた科研費申請のあり方や注意点等についての講演を行ないますので、ご参加下さい。

日 時 2017年9月6日(水) 9:50~12:00

場 所 北海道大学工学部「オープンホール」

司会 北大教授 三浦誠司

9:50 開会の挨拶 新家光雄

9:55~11:00 科研費の最新の動向 学術振興会 大鷲正和

11:00~11:10 一休憩

司会 東工大教授 細田秀樹

11:10~11:20 大型科研費申請にあたって 京大教授 田中 功

11:20~11:40 パネルディスカッション
申請者から見た科研費申請
大鷲正和 田中 功 細田秀樹(兼司会)

11:40~11:50 総合質疑

11:50 閉会の挨拶 新家光雄

企画責任者 北大教授 三浦誠司

テーマ責任者 東工大教授 細田秀樹

18th KIM/JIM Symposium

Title: Interplay between Phase Transformation and Deformation in Advanced Structural Materials

Venue: Hokkaido University (<https://www.global.hokudai.ac.jp/>)

Date: Sep. 06, 2017 (10:00-17:05)

Organizers: Heung Nam Han (Seoul National University, Korea)
Koichi Tsuchiya (National Institute for Materials Science, Japan)

Program:

10:00-10:10 **Opening address**

Koichi Tsuchiya (National Institute for Materials Science, Japan)

Hideharu Nakashima (President, JIM, Japan)

〈Chairpersons: Koichi Tsuchiya and Heung Nam Han〉

10:10-10:30 (KJS-1)

Effects of martensitic transformation on tensile deformation of TRIP aided lean duplex stainless steel

Kyung-Tae Park¹, Ki-Chae Chung¹, Ik-Soo Shin¹,

Jeom-Yong Choi², Heung Nam Han³

¹ Hanbat National University, Korea

² POSCO Tech. Res. Lab., Korea

³ Seoul National University, Korea

10:30-10:50 (KJS-2)

Roles of transformation interface for controlling microstructure and properties of high strength steels

Tadashi Furuhashi, Goro Miyamoto

Tohoku University, Japan

10 : 50-11 : 10 (KJS-3)

Nanoindentation: "Still" an useful tool for developing new structural materials

Jae-Il Jang, Dong-Hyun Lee, Woo-Jin Kim, Yun Cho
Hanyang University, Korea

11 : 10-11 : 30 (KJS-4)

Industrial control method of retained austenite in automotive sheet steel products

Yoshimasa Funakawa
JFE Steel Corp., Japan

11 : 30-11 : 50 (KJS-5)

Continuous cooling characteristics of Ti-5Al-2.5Fe alloy with oxygen content

Yong-Taek Hyun, Do-Heon Kim, Jong-Woo Won
Korea Institute of Materials Science, Korea

11 : 50-12 : 10 (KJS-6)

Controlling mechanical property by deformation-induced omega phase in biomedical beta-titanium alloys

Masaaki Nakai
Kindai University, Japan

12 : 10-12 : 30 (KJS-7)

Mechanical behavior of nanoporous gold depending on microstructure of precursor gold-silver alloy

Ju-Young Kim, Eun-Ji Gwak, Hansol Jeon, Na-Ri Kang, Eunji Song
Ulsan National Institute of Science and Technology, Korea

12 : 30-13 : 30 —Lunch—

〈Chairpersons: Tadashi Furuhashi and Sung-Joon Kim〉

13 : 30-13 : 50 (KJS-8)

Towards the development of Mg alloys formable at room temperature

Nack Joon Kim¹, J. H. Kim¹, J. H. Hwang¹, T. T. T. Trang¹, J. H. Zhang²
1 Pohang University of Science and Technology, Korea
2 Harbin Engineering Univ., China

13 : 50-14 : 10 (KJS-9)

Deformation twinning and stress induced martensitic transformation of Mg alloy

Daisuke Ando¹, Yukiko Ogawa², Yuta Takeuchi¹, Yuji Sutou¹, Junichi Koike¹
1 Tohoku University, Japan
2 National Institute for Materials Science, Japan

14 : 10-14 : 30 (KJS-10)

A study on deformation and failure behaviors of AZ31 and E-form Mg alloys under bending and Erichsen testings

Shi-Hoon Choi, Jaiveer Singh, Min-Seong Kim
Sunchon National University, Korea

14 : 30-14 : 50 (KJS-11)

Selection rule for twinning mode of deformation-induced epsilon-martensite

Takahiro Sawaguchi¹, Zhang Xin²
1 National Institute for Materials Science, Japan
2 Hebei University of Technology, China

14 : 50-15 : 10 (KJS-12)

Development of tunable TiCuNiSiSn superelastic alloys

Eun Soo Park, Wook Ha Ryu
Seoul National University, Korea

15 : 10-15 : 20 —Break—

〈Chairpersons: Takahiro Sawaguchi and Sung-Joon Kim〉

15 : 20-15 : 40 (KJS-13)

Mechanical properties of the Co-Cr-Mo alloy single crystal

for the biomedical application

Koji Hagihara, Takayoshi Nakano
Osaka University, Japan

15 : 40-16 : 00 (KJS-14)

Effect of hydrogen absorption on the mechanical behavior of CoCrFeMnNi high entropy alloy

Jin-Yoo Suh¹, Yakai Zhao², Han-Jin Kim¹, M.P. Phaniraj³, Heung Nam Han³, Jae-il Jang²
1 Korea Institute of Science and Technology, Korea
2 Hanyang University, Korea
3 Seoul National University, Korea

16 : 00-16 : 20 (KJS-15)

Plastic deformation of single crystals of the CrMnFeCoNi high-entropy alloy

Norihiko Okamoto, Haruyui Inui
Kyoto University, Japan

16 : 20-16 : 40 (KJS-16)

Simultaneous increasing strength and ductility of Al alloy by intentional discontinuous precipitation

Seung Zeon Han¹, Eun-Ae Choi¹, Sung Hwan Lim², Kwangho Kim³
1 Korea Institute of Materials Science, Korea
2 Kangwon National University, Korea
3 Pusan National University, Korea

16 : 40-17 : 00 (KJS-17)

Microstructure design for enhancing fatigue crack closure: roles of phase stability and second phase morphology

Motomichi Koyama¹, Zhao Zhang¹, Meimei Wang², Dirk Ponge³, Dierk Raabe³, Kaneaki Tsuzaki¹, Hiroshi Noguchi¹, Cemal Cem Tasan²
1 Kyushu University, Japan
2 Massachusetts Institute of Technology, USA
3 Max-Planck-Institut fuer Eisenforschung GmbH, Germany

17 : 00-17 : 05 **Closing remarks**

Heung Nam Han (Korea Institute of Materials Science, Korea)

企画シンポジウム

Ti合金の構造材料としての現状と今後の展望

Ti合金は高温軽量材料として、航空機エンジンや自動車用マフラーなどに使われており、高温強度、クリープ特性、疲労、耐酸化特性などのバランスが要求される。また、加工プロセス条件により組織が変化することから大きく特性が変わってしまうなど、製造における困難もある。航空機エンジンやその他の高温アプリケーションにおいて、現在までの技術の発展および技術的な課題を企業の方からご講演いただき、高温構造材料としてのTiの可能性について議論しますので、ご参加下さい。

日時 2017年9月7日(木) 9:00~11:00

場所 北海道大学工学部(金属学会Q会場)

プログラム

- 9:00 開会の挨拶 御手洗容子
- 座長 江村 聡
- 9:05~9:40 汎用元素を活用したチタン合金の開発 新日鐵住金 上席主幹研究員 高橋一浩
- 9:40~10:15 航空機向けチタン合金の鍛造技術 神戸製鋼所主任研究員 逸見義男
- 10:15~10:20 —休憩—
- 10:20~10:55 航空機エンジン Ti合金鍛造部材の研究開発、その最前線と今後の課題 IHI 技師長 錦織貞郎

10:55 閉会の挨拶 御手洗容子
企画責任者 物材機構グループリーダー 御手洗容子
テーマ責任者

成島尚之(東北大学教授) 江村 聡(物材機構主幹研究員)

日本金属学会創立80周年記念シンポジウム

日本金属学会創立80周年記念特集「材料科学の変遷と展望
～社会からの要求に応じて～」

「まてりあ」編集委員会では、56巻3号において、本会の創立80周年を記念し、2010年代の金属材料の研究の軌跡をたどり、これから金属学会が進むべき方向を考える特集を各分科により企画発行いたしました。

この度、これに関連した講演者によるシンポジウムを開催いたします。皆様のご聴講をお待ちしております。

開催日時 2017年9月7日(木) 13:30～17:00(大会2日目・午後)

開催場所 北海道大学工学部「オープンホール」

開催挨拶 13:00 名大教授 山本剛久(会報編集委員会委員長)

座長 長谷川 誠(横浜国大)

13:05～13:30 材料と社会—第0分科の設置とそれがもたらした
もの 九産大 黒田光太郎(第0分科)

13:30～13:55 蓄電池材料の最近の展開

東北大教授 高村 仁(第1分科)

13:55～14:20 水溶液腐食研究に関する課題と展望

東北大教授 武藤 泉(第2分科)

一休憩 10分—

座長 梅津理恵(東北大)

14:30～14:55 熱-電力変換の新展開

九大准教授 宗藤伸治(第3分科)

14:55～15:20 近年の金属系バイオマテリアル研究開発の展開；
チタン系バイオマテリアルを中心として

東北大名誉教授 新家光雄(第4分科)

一休憩 10分—

座長 水本将之(岩手大)

15:30～15:55 金属材料の水素脆化と今日の課題

東北大教授 秋山英二(第5分科)

15:55～16:20 社会基盤を支える鉄鋼材料の進化

豊田中研主監 三田尾眞司(第5分科)

16:20～16:45 透過電子顕微鏡法の最新技術動向と将来展望

東大教授 幾原雄一(第5分科)

閉会の辞 16:45～16:50

東北大准教授 大塚 誠(会報編集委員会副委員長)

日本金属学会・日本鉄鋼協会講演大会相互聴講のお知らせ

本会と日本鉄鋼協会との連携強化の一環として講演大会相互聴講を実施いたします。ご利用下さい。

申込方法：当日受付

鉄鋼協会の講演を聴講する場合は金属学会で従来の参加受付を済ませた後、鉄鋼協会受付で相互聴講の申込みをする。

(注) 金属学会で講演発表する場合は、金属学会の正規大会参加申込みが必要です。

料 金：一般・学生・非会員を問わず同一料金

聴講のみ(概要集 DVD 無し)	3,000円
聴講と概要集 DVD(1冊)	6,000円

第4回ランチンセミナー開催のお知らせ

前回の春期講演大会に引き続き、第4回ランチンセミナーを開催いたします。このセミナーは、参加者の皆様に講演大会の昼食時間を利用して昼食をとって頂きながら、企業による最新の技術情報を聴講いただくことを企画いたしました。参加無料です。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

主催 公益社団法人 日本金属学会

企画 株式会社 明報社

日時 2017年9月7日(木) 昼休み時間

会場 北海道大学(工学部 B, C 棟(講演会場))

参加費：無料 昼食を無料提供いたします。

参加企業・参加方法：次号9号にて詳細をご案内いたします。

～ 皆様のご参加をお待ちしております!! ～

日本金属学会・日本鉄鋼協会 第7回女性会員のつどい

日本金属学会と日本鉄鋼協会は、2007年に男女共同参画合同委員会を設置し、学会期間中の託児室合同設置、若い会員向けのキャリアパスを考えるランチンミーティング、合同ホームページや育児・男女共同参画等の情報交換するためのメーリングリストの開設を行うなど、金属・材料分野における女性会員の活動を支援し、女性会員の増強を目指しています。

昨年に引き続き、秋期大会期間中に女性会員の皆さんが気軽に意見交換できる「つどい」を行います。ランチを楽しみながら、楽しいひとときを過ごしませんか。

主催 日本金属学会・日本鉄鋼協会男女共同参画合同委員会

日時 2017年9月8日(金) 12:00～13:00

会場 北海道大学 工学部「物工系会議室(A1-17)」

(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

内容 女性会員の交流・人脈作り。キャリアデザイン意見交換。仕事場や上司・部下への困ったこと等本音トーク。学会への要望。などなど

参加資格 金属学会・鉄鋼協会女性参加者。学生さん、子連れもwelcome♪

参加申込 申込みは不要です。直接、会場へお越し下さい。

持ち物 弁当、飲み物は持参をお願いします。

この「つどい」に参加して、静かな部屋でゆっくり語り合しましょう♪♪♪

問合せ 梅津理恵(東北大学)E-mail: rieume@imr.tohoku.ac.jp

平成29年度秋季 全国大学材料関係教室協議会 講演会ご案内

日時 2017年9月8日(金) 14:30～15:30

場所 北海道大学工学部フロンティア応用科学研究棟2階セミナー室

聴講料 無料

〈講演会〉

14:30～15:30 計算材料科学の現状と将来への期待

東北大学金属材料研究所特任教授 毛利哲夫

日本鉄鋼協会・日本金属学会
男女共同参画委員会
10周年記念シンポジウム
「企業・大学での女性活用と
ダイバーシティ推進を考える」

2006年に発足した日本鉄鋼協会と日本金属学会の男女共同参画委員会は今年で10周年を迎えました。

この度、2017年の鉄鋼協会・金属学会秋期講演大会を北海道大学で開催するにあたり、委員会の10年間の取り組みを振り返ると共に、開催地である北海道大学様、北海道で活躍する企業であるカールビー株式会社様、鉄鋼材料メーカーのJFEスチール株式会社様から講師をお招きし、男女共同参画の取り組みをご紹介します。一般の方々もご聴講いただけます。皆様のご参加をお待ちしております。

日時 2017年9月9日(土) 9時開場 9:30-12:05

会場 北海道大学工学部「オープンホール」

主催 日本鉄鋼協会・日本金属学会男女共同参画委員会

共催 日本鉄鋼協会、日本金属学会

後援 北海道大学女性研究者支援室、男女共同参画学協会連絡会、北海道、札幌市、北海道新聞社

入場無料

事前参加申込 ホームページ：講演大会よりお申込み下さい。

<https://data.jim.or.jp/jim/danjo/>

※当日参加も可能です。

プログラム

〈司会進行〉 金属学会男女共同参画委員会副委員長

奈良女子大学 研究院自然科学系 准教授 松岡由貴

9:30～9:45

開会の挨拶、ならびに「男女共同参画委員会10年のあゆみ」

男女共同参画委員会委員長

東北大学金属材料研究所 准教授 梅津理恵

9:45～10:30

講演「北海道大学における女性研究者支援の取組

～ダイバーシティ研究環境の実現に向けて～」

北海道大学 人材育成本部女性研究者支援室 室長 教授

長谷山美紀 様

10:30～10:45 一休憩—

〈司会進行〉

鉄鋼協会男女共同参画委員会

物質・材料研究機構 主幹研究員 戸田佳明

10:45～11:15

講演「JFEスチールにおけるダイバーシティ推進について」

JFEスチール株式会社 組織人事部 ダイバーシティ推進室長

近藤達哉 様

11:15～12:00

講演「ダイバーシティ推進はやめられない、とまらない。」

カールビー株式会社 人事総務本部 ダイバーシティ委員会 委員長

新谷英子 様

12:00～12:05

閉会の挨拶

男女共同参画委員会副委員長

九州大学大学院工学研究院 教授 尾崎由紀子

問合先 日本金属学会 男女共同参画委員会

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: gaffair@jim.or.jp

第15回 World Materials Day Award 募集

材料系国際学協会連携組織であるIOMMMS(International Organization of Materials, Metals and Minerals Societies)では、国際連携活動の一環として、材料系分野のプレゼンス向上のためWorld Materials Dayを制定し(毎年11月の最初の水曜日)、この日に世界同時に、「材料に関する知識とその重要性を社会や若者に啓発する活動」に貢献があった学生を顕彰しております。本年は、11月1日(水)に顕彰いたします。

募集要項

1. 対象となる活動：次の3部門で募集します。

第1部門：社会における材料の重要性を示すホームページ

第2部門：学園祭やキャンパスオープンデー等での該当する展示物、作品等

第3部門：その他(材料教育プロジェクト、青少年対象の材料実験等)

2. 応募資格者

日本在住の高等専門学校生、大学学部学生、修士課程大学院生(グループも可)。

日本金属学会の会員でなくても応募できるが授賞決定後には会員になることが望ましい。

3. 展示方法

日本金属学会秋期講演大会(2017年9月6～8日、北海道大学)において、応募作品を展示する。

• 展示場への作品の搬入および搬出は応募者が行う。

• 展示パネルと電源は準備しますがそれ以外の備品などは応募者各自が準備すること。

4. 審査方法

• 審査員は理事会で決定し、展示場で審査する。

• 審査の観点：材料啓発活動への寄与度、内容の新鮮さ、表現力、意欲などの個別項目を5点法で採点し総合点で審査する。

5. 授賞

① World Materials Day Award：最優秀作品1作品(または1グループ) 副賞5万円

② 各部門賞：各部門1作品に表彰、賞状のみ。

贈呈はWorld Materials Dayに受賞者の所属する機関で行う。

6. 応募要領

• メールによる申込み記載事項(応募者名、住所、所属、作品名、応募分野・部門、展示方法(web、実物、写真、ビデオ等)、展示必要スペース・重量などを明記して応募下さい。

〈申し込み〉

：下記アドレス宛にお申込下さい。受理通知を送信します。(応募様式はホームページ：講演大会からダウンロード下さい)

応募期間：2017年7月1日～8月31日

申込・問合先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32

(公社)日本金属学会 各種賞係

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: gaffair@jim.or.jp

☆たくさんのご応募お待ちしております。

2017年秋期講演大会会期中の託児室設置のお知らせ

2017年秋期講演大会期間中、日本金属学会と日本鉄鋼協会が共同で託児室を開設いたします。利用ご希望の方はホームページ掲載の申込要領をご確認の上「託児室利用申込書」に記入頂き、下記シッター会社へ直接お申し込み下さい。

■設置期間および利用時間(開始、終了時間は予定です)

設置期間	利用時間
2017年9月5日(火)	13:00~18:30
2017年9月6日(水)	8:30~17:30
2017年9月7日(木)	8:30~17:30
2017年9月8日(金)	8:30~16:45

■場 所 北海道大学札幌キャンパス内(お申し込みの方へ直接ご連絡いたします)

■対象・利用料金

0歳~2歳 お子様1人につき 2,000円/1日
3歳 お子様1人につき 1,500円/1日
4歳~学童まで お子様1人につき 1,500円/1日
※利用時間外の場合 500円/1時間(追加料金)
1~2時間であれば可能

利用料金は、利用当日、日本金属学会受付にお支払い下さい。
なお、申込締切後のキャンセルはキャンセル料を頂く場合がありますので、あらかじめご了承下さい。

■利用シッター会社 (株)札幌シッターサービス
(<http://www.sapporobaby.com/>)

■申込方法

- 本会ホームページにある託児室案内の「託児室利用規約」をご確認の上「託児室利用申込書」をダウンロードし、必要事項をご記入の上、下記問い合わせ先のシッター会社にE-mailもしくはFAXでお申し込み下さい。
 - メールでの申し込みの際は、件名に「秋期講演大会の託児室予約」とご記入の上、託児利用申込書を添付下さい。
- ※お申込み受領後3営業日以内に、(株)札幌シッターサービスより受領確認をお送りします。

■申込期間 2017年7月10日(月)~8月29日(火)まで
(定員になり次第締め切らせて頂きます)

■申込・問合せ先 (株)札幌シッターサービス 担当) 杉山, 奥山
☎ 011-261-1873
E-mail: info@sapporobaby.com

2018年春期講演大会公募シンポジウムテーマ提案募集

提案期限: 2017年9月1日(金) 期日厳守

会員の研究活動一層の活性化を図ることを目的として、春秋大会において会員からの提案テーマによるシンポジウム講演を実施しており、活況を呈しております。明年の秋期大会の公募シンポジウムテーマを募集いたします。次の要領をご参照のうえ、活発な討論が期待できる有益なテーマを積極的にご提案下さい。

【募集対象の大会】 2018年春期講演大会(千葉工業大学)

詳細は、まてりあ7号466頁 or ホームページ(講演大会)をご覧ください。

公益社団法人日本金属学会 「研究会」新規・更新申請募集

研究会の登録を希望される方は研究会実施要領および下記規則をご参照の上、お申込下さい。

新規申請の研究会は新規申請用紙、継続延長申請の研究会は継続更新申請用紙でお申込下さい。(申請用紙はホームページよりダウンロードして下さい。)

詳細は、まてりあ7号:466頁 or ホームページ(研究会)をご覧ください。

申請締切: 2017年9月1日(金)

電子ジャーナル機関購読のご案内

機関(IPアドレス)認証による電子ジャーナルのご購読が可能となっております。ご利用下さい。

対象誌 日本金属学会誌, Materials Transactions

年間購読料金 別途お知らせいたします。お問合せ下さい。

対象期間 大学類, 独立行政法人, 企業等

問合せ先 〒105-0022 東京都港区海岸1-9-18 国際浜松町ビル
丸善雄松堂株式会社 学術情報ソリューション事業部
外国雑誌・eリソースセンター

☎ 03-6367-6114 FAX 03-6367-6184

E-mail: epro-j@maruzen.co.jp

永年会員制度について

本会では長年にわたり本会の発展に尽された会員の労に報いるため、永年会員制度を設けております。自己申告制となっておりますので、該当すると思われる方は、はがき、FAX又はE-mailにて会員番号、生年月日およびおおよその入会年を記入の上、本会事務局宛お問い合わせ下さいませようお願いいたします。

申し出られた方について調査確認し、該当者については理事会に諮り、承認の上ご案内申し上げます。

永年会員制度 会員歴が継続して40年以上でかつ満71才以上の会員に対し「永年会員」の称号を贈る。永年会員は正員会費を免除する。

受付締切 毎年9月30日

永年会員資格付与 毎年1月1日

問合せ先 (公社)日本金属学会 ☎ 022-223-3685

〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32

E-mail: member@jim.or.jp



第41回公益社団法人日本金属学会技術開発賞 「新技術・新製品」記事募集

応募締切：2017年10月31日(火)

[本賞の趣旨]

本会は創意あふれる開発研究を推奨する目的で、金属工業に関する独創性に富む新技術・新製品の技術開発に優れた実績を取めた技術者に対し、本賞を授賞するものである。

- (注1)本賞は、当該年度の日本金属学会会報「まてりあ」“新技術・新製品”の欄に掲載された記事が、選考対象となる。
(注2)本賞受賞業績は、日本学術振興会卓越研究成果公開事業/卓越研究データベース「発明と発見のデジタル博物館 (<http://dbnst.nii.ac.jp/>)」に登録され、広く周知されます。

技術開発賞募集要綱

1. 賞の名称 第41回公益社団法人日本金属学会技術開発賞

2. 対象となる業績と区分など

- 次の部門およびそれらにまたがるものとする。
 - 材料基礎技術部門, b. 素材製造・評価技術部門,
 - 素材応用技術部門, d. 新素材開発部門, e. その他
- 評価は次の諸点について行われる。
 - 独創性
 - 技術, システムあるいは製品に関する有用な発明, 考案, 改良(有用性)
 - 技術上の問題解決に役立ち, あるいは新製品の開拓をさらに促す可能性(将来性)
 - 生産実績その他本賞に相当と思われる新技術・新製品の開発に優れた実績があるもの
- いわゆる「金属」のみでなく, その周辺の材料, たとえば燃料, 耐火物, 半導体, 複合材料などに関するものでもよい。
- 応募の時点で, 他の公募制の褒賞(発明協会賞, 大河内賞など)を受けていない斬新な主題であることが望ましい。

3. 応募者の条件

- 1件につき10名以内のグループまたは個人
直接開発に関与した技術者であって, 単なる職制上の管理者や代表者を含まないことが望ましい。
- 応募する時点で本会会員である必要はないが, 本会会員となることが望まれる。

4. 選考

- 受賞者の選考は選考委員会で行う。選考委員は本会理事会が毎年選任し, 会長が委嘱する。
- 理事会が授賞該当無しと認めた場合は, その年度は授賞しない。
- 選考に当たって, 特許係争等が問題となった記事は授賞対象から除外する事がある。

5. 授賞

- 2018年6月末日までに受賞者を内定する。
- 2018年秋期講演大会において授賞する。
- 受賞者には賞状(全員)と副賞(1賞牌)が贈呈される。

6. 技術開発賞受賞記念講演

技術開発賞受賞をより意義深いものとするため, 受賞記念講演をお願いします。

第41回の受賞記念講演は, 2018年秋期講演大会(東北大学, 9月予定)の折りに行います。

7. 受賞決定までの流れ

応募(10月31日締切) → 査読 → まてりあ掲載(57巻(2018年)1号から) → 選考・受賞決定(2018年6月) → 授賞(2018年9月)

まてりあ「新技術・新製品」記事への応募の方法

1. 応募・原稿締切

- 2017年10月31日(火)
- 申し込み受理順を参考に会報「まてりあ」に第1号から第3号まで掲載する。

2. 応募記事は編集委員会の査読を経て, 日本金属学会会報「まてりあ」に掲載する。

掲載記事が技術開発賞の選考対象となる。

掲載が決まった場合には, 240,000円(維持員会社社員の場合は210,000円)の投稿料を納入すること。

ただし, 掲載号1冊, 掲載記事のPDFファイル, 別刷100部を無料とする。

3. 応募記事の記述に当たっては, 次の各項に留意されたい。

- 社名, 商品名その他, 商業用呼称を用いることは差し支えないが, その内容が一般に理解できるよう説明を付すこと。
- know-howに属する事項を記述する必要はないが, 新技術・新製品の特色などが理解できるようなデータを含める。
- 現在までの実績, 経済性, 特許関係など「技術開発賞」選考に参考となる項目をなるべく含めること。
- 特許関係等についての記述は十分に注意すること。

4. 原稿作成について

- 原稿は本文, 図(写真)および表を含めて刷り上がり3頁以内(約6,700字)とする。
- 原稿は図・表の説明を含めて全て日本語とする。物理量の単位はなるべくSI単位系による。
- 原稿はレイアウトの体裁にあわせて作成する。
- 応募はホームページからできます。
URL <http://gijutsu.jim.or.jp/entry>
ホームページから直接入力→印刷(2枚目最後に要ご署名)→原稿と一緒に提出→事務局確認→受付完了。

本文, 図表, レイアウトを別に作成し, Zip形式でまとめる。

① **レイアウト用紙**(ダウンロードできます)

② **図(写真)・表**

- 図と写真は区別せず図1, 図2…のように, 表は, 表1, 表2…のようにそれぞれ通し番号とする。

- 写真にはスケールを入れる。

- それぞれキャプションを付すること。

(記述は横軸・縦軸・説明も含め日本語とする。)

- カラー原稿にはカラー印刷の有無を必ず明記する。

- カラー印刷は刷り1頁:35,000円を著者が負担する。

5. 本会では, まてりあに掲載の著作物の著作権を本会に帰属させていただきます。

6. まてりあ一般記事の要領に従うこと。(まてりあ掲載「新技術・新製品」記事を参考にして下さい)

7. 提出資料

- 応募表紙(署名を記入すること)

応募表紙は入力画面から作成できます。

応募表紙はプリントアウトし, 自署にてご署名下さい。

② レイアウトされた原稿

③ 本文テキスト

④ 図表原稿

◎①～④のデータファイル(Zip形式でアップロードする。)

* ホームページ表彰関係→技術開発賞募集→応募画面(入力)→プリントアウト(署名)→原稿と一緒にアップロードして下さい。

問合先 (公社)日本金属学会各賞係

☎ 022-223-3685 E-mail: gaffair@jim.or.jp

「新技術・新製品」記事の問合・送信先

まてりあ係 E-mail: materia@jim.or.jp

～とっておきの作品を是非ご応募下さい～

光学顕微鏡写真だけでも応募できます

応募締切：2017年10月20日(金)

Web 申込です！！

1. 募集部門

下記4部門で行っております。

各部門とも試料，方法，結果などにオリジナリティーのある高い学術的価値が認められるもの，試料処理，写真処理他において技術的価値が高く，また，オリジナルな技術が含まれるもの，教材や写真集の編集などの際に利用できるような典型的な組織写真であるものを選考対象とします。

それぞれ，優秀賞および奨励賞作品を選考授賞し，各部門の優秀賞から特に優れた作品について最優秀賞を贈ります。ただし，該当する作品がないときは授賞しないことがあります。

「写真賞部門」

1. 光学顕微鏡部門
2. 走査電子顕微鏡部門(分析, EBSD等を含む)
3. 透過電子顕微鏡部門(STEM, 分析等を含む)
4. 顕微鏡関連部門(FIM, APFIM, AFM, X線CT等)

注：光学顕微鏡と透過電子顕微鏡写真，走査電子顕微鏡と透過電子顕微鏡写真等の組写真を応募する場合，応募者が最も適切と判断する部門を選択すること。

2. 申込要領

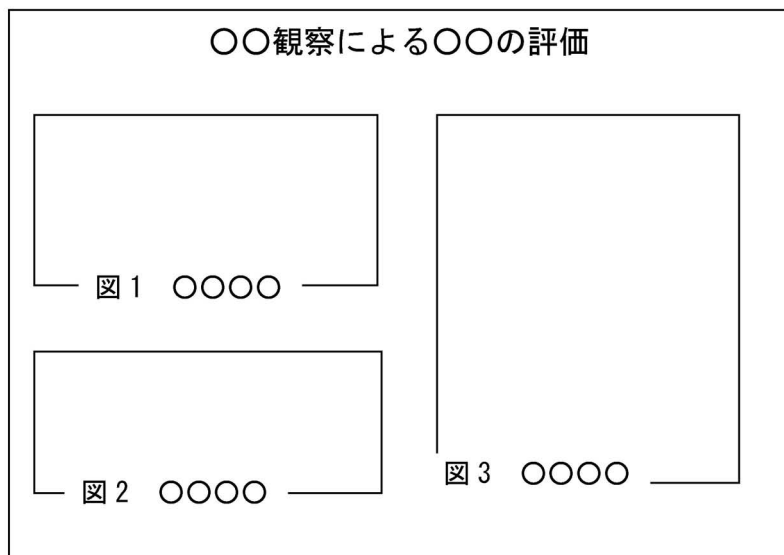
応募は，下記 URL の申込フォームに説明文を入力し，写真作品データを提出する。

URL <http://picture.jim.or.jp/entry>

【申込フォーム】

- ①応募部門：4部門の該当する部門を選択する。
- ②題目
- ③作品の説明
- ④学術的価値(新規性，波及効果について世界の情勢に照らして記入)

【作成例】写真解像度：A2版サイズを前提に400dpi以上
(写真見本)



(申込フォーム：入力項目)

- ①応募部門(1. 2. 3. 4.)
- ②題目
- ③作品の説明
- ④学術的価値
- ⑤技術的価値
- ⑥組織写真の価値(特記事項等)
- ⑦材料名
- ⑧試料作製法
- ⑨観察手法
- ⑩作品の出典
- ⑪応募者・共同研究者
- ⑫応募者連絡先

- ⑤技術的価値(試料，試料作製，写真処理において新規性，独自性について記入)
- ⑥組織写真の価値(組織写真作品としての新規性や優れた点など，特記事項を記入)
- ⑦材料名
- ⑧試料作製法
- ⑨観察手法
- ⑩作品の出典(作品はオリジナルまたは本会帰属の写真で使用許可のあるものに限る.)
- ⑪応募者・共同研究者
- ⑫連絡先

【写真作品】

- ①写真データの解像度は，A2版サイズを前提に400dpi以上とする。
- ②写真データはPDFまたは画像ファイル(jpgなど)で提出すること。(それ以外はプレビュー表示出来ません)
- ③写真と図の組み合わせでも提出は可(写真，図への挿入文字は小さすぎないこと)。
- ④作品には，応募者名，共同研究者名を記載しない。
- ⑤応募作品数の制限：無し。
- ⑥他学協会等の同様の賞を受賞していない作品であること。

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32

(公社)日本金属学会 金属組織写真賞係

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: gaffair@jim.or.jp

申込 URL <http://picture.jim.or.jp/entry>

〈公募類記事〉

無料掲載：募集人員，締切日，問合せのみ掲載。
 有料掲載：1/4頁(700～800文字)程度。
 ・「まてりあ」とホームページに掲載；15,000円＋税
 ・ホームページのみ掲載；10,000円＋税
 〈その他の記事〉 原則として有料掲載。
 ・原稿締切・掲載号：毎月1日締切で翌月号1回掲載
 ・原稿提出方法：電子メールとFAX両方(受け取りメールの確認をして下さい)
 ・原稿送信先：FAX 022-223-6312 E-mail: materia@jim.or.jp

◇国立大学法人 岩手大学理工学部 教員 公募◇

職名および人員 教授1名

所属学科等名 物理・材料理工学科 マテリアルコース(理工学部)，総合科学研究科理工学専攻 材料科学コース(修士課程)，工学研究科フロンティア物質機能工学専攻(博士課程)

専門分野 材料工学(金属・半導体・セラミクスに関する生産工学など)

担当授業科目

- 専門科目：材料物理化学，電気化学，材料組織学，非鉄製錬，半導体理工学，誘電体材料学，反応工学，エコ材料学などの学部の科目のうち数科目と材料物理化学特論などの大学院修士課程，博士後期課程の科目を担当して頂きます。
- 教養教育科目：学則により全学体制で実施することになっています。具体的には，採用後，自身の専門分野に関連した科目委員会へ所属し，委員会の所掌する科目を担当することになります。そのほか「基礎ゼミナール」を担当することもあります。

応募資格

- 博士の学位を有する方
- 国籍は問わないが，日本語で教育と大学運営に対応できる方
- 地方大学の現状を理解して教育・研究および大学運営に対応できる方

岩手大学は男女共同参画を推進しています(<http://www.iwate-u.ac.jp/gender/>)。男女共同参画社会基本法の趣旨に則り，教育，研究，地域貢献等の業績および人物の評価において，同等と認められる場合には女性を優先します。

採用予定日 2018年4月1日 以降

任 期 なし

提出書類

- 履歴書(写真貼付，所属学会，E-mail アドレス記載)
- 研究業績リスト(学術論文，著書，解説・総説，国際会議論文，学会発表リスト，特許などに分類して 記載)
- 主要な学術論文別刷(5編以内，コピー可)
- 研究業績の概要(A4用紙2枚程度)
- 着任後の教育と研究に対する抱負(A4用紙2枚程度)
- 科学研究費等外部資金取得状況(代表，分担の別を明記)と受賞歴の一覧
- 応募者について問い合わせ可能な方2名の氏名，所属，連絡先

応募締切日 2017年9月29日(金)必着

応募書類の提出先および問合せ先

〒020-8551 盛岡市上田4-3-5
 岩手大学理工学部物理・材料理工学科マテリアルコース長
 吉本則之 ☎ 019-621-6355(直通)
 E-mail: yoshimoto@iwate-u.ac.jp

※封筒の表に「マテリアルコース教員応募書類在中」と朱書きし，簡易書留で送付して下さい。なお，ご提出いただいた書類は返却致しませんので，予めご了承下さい。

その他 必要な場合に面接を実施します。(旅費は原則として自己負担)

◇大阪大学 接合科学研究所 教員 公募◇

公募人員 教授1名

(大阪大学は男女共同参画を推進しています。女性研究者の積極的な応募を期待します。)

所 属 大阪大学接合科学研究所 接合プロセス研究部門 加工プロセス学分野

専門分野 ものづくりにおける環境負荷低減と溶接・接合構造体のロバストネスに資する高能率・高効率な先進加工プロセス開発に関する基礎・応用研究を行うとともに，接合部の機械的・材料科学的特性の向上を基軸にした先進加工システムの最適化のための研究教育を行い，溶接・接合科学の進歩・発展に寄与できる方。

応募資格 博士の学位または外国のPh.D.を有する方

着任時期 採用決定後，可能な限り早い時期

任 期 期間の定めなし

選考方法 書類審査(必要に応じて面接を実施)

応募要領

- 必要書類
 - 履歴書(写真貼付)
 - 研究業績目録(査読付原著論文，国際会議論文，著書，総説・解説，特許，その他に分類下さい。原著論文がインパクトファクターを有する場合はインパクトファクターを，また被引用件数も併記して下さい。)
 - 主要論文別刷(5編以内，コピー可)
 - これまでの研究業績の概要(A4用紙2ページ程度)
 - 着任後の研究教育活動の計画と抱負(A4用紙2ページ程度)
 - 科研費等外部資金獲得の状況(代表者あるいは分担者を明記)
 - その他の特記事項(受賞，国内外での学会活動，社会活動，産学官連携など)
 - 2名の方からの推薦書(別送または別封)，
または応募者について所見を伺える方2名の氏名と連絡先

応募締切日 2017年9月29日(金)必着

応募書類の提出先

〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘11-1
 大阪大学接合科学研究所 庶務係長宛
 ☎ 06-6879-8677

※封筒に「大阪大学接合科学研究所 接合プロセス研究部門 加工プロセス学分野教員 応募書類在中」と朱書きし，簡易書留で郵送のこと。応募書類は原則として返却しません。

本件に関する問合せ先

〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘11-1
 大阪大学接合科学研究所長 南 二三吉
 ☎ 06-6879-8640 E-mail: minami@jwri.osaka-u.ac.jp
 接合科学研究所 HP：
<http://www.jwri.osaka-u.ac.jp/index.jsp>

◇レアメタル研究会◇

■主催 レアメタル研究会
 主宰者 東京大学生産技術研究所 岡部 徹 教授
 協力 (一財)生産技術研究奨励会(特別研究会 RC-40)
 共催 東京大学マテリアル工学セミナー
 レアメタルの環境調和型リサイクル技術の開発研究会
 東京大学生産技術研究所 持続型エネルギー・材料統合研究センター
 東京大学生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付研究部門 (JX 金属寄付ユニット)
 協賛 (公社)日本金属学会 他
 ■開催会場 東京大学生産技術研究所
 An 棟 2F コンベンションホール
 (〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1)
 (最寄り駅: 駒場東大前, 東北沢, 代々木上原)
 ■参加登録・お問合わせ
 東京大学 生産技術研究所
 岡部研究室 レアメタル研究会事務担当 宮崎智子
 E-mail: okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp

〈平成29年度 レアメタル研究会開催予定のご案内〉 (2017.6.30現在)

- 第77回 2017年9月15日(金)
 (寄付ユニット特別シンポ「非鉄におけるマイナーメタル」11月10日(金))
- 第78回 2017年11月17日(金)
- 第79回 2018年1月12日(金)
 ★貴金属シンポジウム(第5回)+新年会★(合同開催)
- 第80回 2018年3月9日(金)
 ★前田正史教授が熱く語る特別シンポジウム+慰労会★(合同開催)

■第77回 2017年9月15日(金)14:00~ An 棟 2F コンベンションホール
 テーマ: 非鉄業界の動向
 時間: 午後2:00~
 講演:
 ・非鉄分野における産学連携の在り方(仮)(60分)
 早稲田大学理工学術院 創造理工学部環境資源工学科 教授
 東京大学 生産技術研究所 客員教授 大和田秀二 講師
 ・産学連携と大学における新しい展開(仮)(30分)
 東京大学 生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付研究部門 特任教授
 岡部 徹 講師
 ・MITにおける産学連携の紹介(仮)(30分)
 Massachusetts Institute of Technology, Research Scientist 大内隆成 講師
 ・理論創りからもの造り, そして思いの橋渡し(60分)
 住友金属鉱山株式会社
 取締役・専務執行役員 資源事業本部長 土田直行 講師
 午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(An 棟 2F ホワイエ)

■第78回 2017年11月17日(金)14:00~ An 棟 2F コンベンションホール
 テーマ: チタンの将来
 時間: 午後2:00~
 講演:
 ・海とチタン-エンジニアの挑戦(仮)(60分)
 ~海洋土木と船舶分野へのチタンの適用~
 一般社団法人日本チタン協会 木下 和宏 講師
 ・低コストチタンの製造の可能性と課題(仮)(30分)
 東京大学 生産技術研究所 教授 岡部 徹 講師
 ・燃料電池車開発から見たチタンとその製造革新への期待(仮)(60分)

トヨタ自動車株式会社
 FC技術・開発部 プロフェッショナル・パートナー 高橋和彦 講師
 午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(An 棟 2F ホワイエ)

■第79回 2018年1月12日(金)14:00~ An 棟 2F コンベンションホール
 ★貴金属シンポジウム(第5回)+新年会★(合同開催)
 テーマ: 貴金属の製錬・リサイクル
 時間: 午後2:00~
 講演: 貴金属の製錬・リサイクル技術に関する講演
 ・講師依頼中
 午後6:00~ ポスター発表 兼 研究交流会
 (An 棟 1F レストラン アーベ(予定))

■第80回 2018年3月9日(金)14:00~ An 棟 2F コンベンションホール
 ★前田正史教授が熱く語る特別シンポジウム+慰労会★(合同開催)
 テーマ: 前田先生の研究と活動, 非鉄業界と研究の将来展望
 時間: 午後2:00~
 講演:
 ・講師依頼中
 ・非鉄金属リサイクルプロジェクトと産官学連携(仮)(60分)
 東京大学 生産技術研究所 教授 前田正史 講師
 午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(An 棟 2F ホワイエ)

レアメタル研究会ホームページ
http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html

★備考: 関連研究会
 〈米国版レアメタル研究会(RMW)のご案内〉
 ■RMW13 Workshop on Reactive Metal Processing (Reactive Metal Workshop)
 March 16 (Fri)-17 (Sat), 2018, Cambridge, MIT
 Reactive Metal WorkshopのHP
<http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/core-to-core/rmw/>



日本金属学会誌掲載論文
Vol. 81, No. 8 (2017)

—論文—

銅ナノワイヤの合成と光焼結による高性能透明導電膜の作製
高悦 石名敏之 丁蘇 酒金婷
菅原 徹 長尾至成 菅沼克昭

熱間押出法によるマグネシウム合金の超ジュラルミン被覆と表面特性の評価
徳永透子 外本和嗣 大野宗一 松浦清隆

各圧下率で冷間圧延を施した5083アルミニウム合金の焼鈍後における再結晶集合組織の変化
塚本雅章

—ラピッドパブリケーション—

液体窒素中放電によるアルミニウム表面への窒化アルミニウム皮膜の生成
吉田昌史 市來龍大 金澤誠司
山崎誠志 内海能亜

Materials Transactions 掲載論文
Vol. 58, No. 8 (2017)

—Regular Articles—

Materials Physics

Crystal Structure of the C-AlRuNi Phase

Rayko Simura, Kazumasa Sugiyama, Shota Suzuki and Toru Kawamata

Photophysical Behaviors at Interfaces between Poly(3-Hexylthiophene) and Zinc Oxide Nanostructures

Lin Feng and Xiao-Tao Hao

Preparation of Anhydrous Calcium Sulfate Whiskers from Phosphogypsum in H₂O-H₂SO₄ Autoclave-Free Hydrothermal System

Hongbin Tan, Faqin Dong, Liang Bian, Xiaochun He and Jingfeng Liu

Microstructure of Materials

Fabrication of 2000 Series Aluminum Alloy Lap Joint Sheets by Magnetic Pulse Welding and Their Interfacial Microstructure Observations

Takaomi Itoi, Syoichi Inoue and Keigo Okagawa

Ultimate Rolling Texture in Pure Aluminum Highly Deformed by Accumulative Roll Bonding: Taylor Orientation Formed beyond Grain Subdivision

Yoji Miyajima, Daisuke Kashioka and Nobuhiro Tsuji

Electromagnetic Field Induced Structure Transition of Aluminum Alloys during Direct Chill Casting

Lei Li, Qingfeng Zhu and Jianzhong Cui

Preparation of Graphite Dispersed Copper Composite on Copper Plate with Spot Welding

Abdul Muizz Mohd Noor, Yoshikazu Ishikawa and Seiji Yokoyama

Mechanics of Materials

Effect of Retained β Phase on Mechanical Properties of Cast Ti-6Al-4V Alloy

Seong-Tak Oh, Kee-Do Woo, Jae-Hwang Kim and Seung-Mi Kwak

Effect of Irradiation Treatment on Compressive Properties of Ultra-High-Molecular-Weight Polyethylene

Masaru Kamiya, Hisao Kikugawa, Takashi Asaka, Masae Kanda and Yoshitake Nishi

Materials Chemistry

Effects of Gas Blow Velocity on the Surface Properties of Ti-6Al-4V Alloy Treated by Gas Blow IH Nitriding

Shogo Takesue, Shoichi Kikuchi, Hiroyuki Akebono, Jun Komotori, Kengo Fukazawa and Yoshitaka Misaka

Influence of Calcium Chloride Addition on Coal-Based Reduction Roasting of Low-Nickel Garnierite Ore

Jingcheng Dong, Yonggang Wei, Chao Lu, Shiwei Zhou, Bo Li, Zhiguang Ding, Chengyan Wang and Baozhong Ma

Materials Processing

Corrosion Resistance of New Copper Alloy Castings Registered in JIS H 5120:2016 Copper Alloy Castings

Hiroshi Yamada, Masaaki Yamamoto, Toshimitsu Okane, Yoshiharu Kousaka, Yoshiyuki Goto and Tomoki Ito

Effect of Joining Conditions on the Shear Strength of Barium Titanate Joint Brazed with Molten Aluminum

Ikuzo Goto, Setsuo Aso and Ken-ichi Ohguchi

Effects of Heat Treatment Conditions on Formation of Expanded-Austenite Phase in Austenitic Stainless Steels by Combining Active Screen and DC Plasma Carburizing Processes

Nobuhiko Satomi, Nobuyuki Kanayama, Youichi Watanabe and Osamu Takai

Investigation of Vacuum Hot-Press Sintering Temperatures on the Sintered Characteristics of Cr-31.2 mass% Ti Alloys

Shih-Hsien Chang, Chien-Lun Li and Kuo-Tsung Huang

Effect of Direct Chill Casting Process Parameters on the Microstructure and Macrosegregation of Mg-Al-Zn Ingot

Xingwei Zheng, Peng Luo, Jie Dong and Wenjiang Ding

Engineering Materials and Their Applications

Facile Synthesis of Nail-Shaped ZnO Microrods by Thermal Evaporation Technique in Ambient Air

Geun-Hyoung Lee

Thermoelectric Properties of In_xFeCo₃Sb₁₂ Consisting Mainly of In-Filled *p*-Type Skutterudites

Jungmin Kim, Ken Kurosaki, Seongho Choi, Yuji Ohishi, Hiroaki Muta, Shinsuke Yamanaka, Misato Takahashi and Junya Tanaka

Comparison of Flip-Chip Bonding Characteristics on Rigid, Flexible, and Stretchable Substrates: Part I. Flip-Chip Bonding on Rigid Substrates

Donghyun Park and Tae Sung Oh

Comparison of Flip-Chip Bonding Characteristics on Rigid, Flexible, and Stretchable Substrates: Part II. Flip-Chip Bonding on Compliant Substrates

Donghyun Park, Kee-Sun Han and Tae Sung Oh

—Rapid Publications—

Heat Treatment to Improve Fatigue Strength of Friction Stir Welded Ti-6Al-4V Alloy Butt Joint

Masaaki Nakai, Mitsuo Niinomi, Yu Ishida, Huihong Liu, Hidetoshi Fujii and Takashi Ninomiya

Mechanism of the Unusual Wetting of a Surface Fine Crevice Structure Created by Laser Irradiation

Vilakazi Siboniso, Jaebong Yeon, Christian Grozescu, Hiroki Goto, Masashi Nakamoto, Ryo Matsumoto, Hiroshi Utsunomiya and Toshihiro Tanaka

Preparation of a Cu Surface with the Hierarchical Structure of a Lotus Leaf via Electroplating and Its Superhydrophobicity

Kai Chen, Tianchi Wang, Yizhuo Zhao, Zhe Zhou, Ziheng Liu, Jian Kong and Hongfu Xiang

—Express Rapid Publications—

Microstructures of Al₃Ni Particles Reinforced Composites by Infiltration and Reaction Method and Their Properties

Yongbum Choi, Zhefeng Zu, Kazuhiro Matsugi, Kenjiro Sugio and Gen Sasaki

Synthesis and Characterization of Highly Elastic TiCu-Based Amorphous Micro-Wires

Benard Odhiambo Obondo, Qiang Li, Chuntao Chang, Xinmin Wang and Deng Pan

Effects of Grain Size and Texture on Thermal Conductivity of AZ31 during Static Recrystallization

Gun-Young Oh, Young-Kyun Kim, Shae K. Kim, Hyun Kyu Lim and Young-Jig Kim

ANNOUNCEMENT

まてりあ 第56巻 第9号 予告

一般記事

- [解説] First-order reversal curve (FORC) 解析と永久磁石材料への適用 岡本 聡他
[最近の研究] 結晶配向性を有する多結晶体の弾性率から単結晶弾性率を決定する手法の構築 多根正和
マグネシウムケイ化物の結晶構造と熱電特性 林 慶

[新進気鋭] 熱電データベースの構築と実験値マテリアルズ・インフォマティクスへの展開 桂 ゆかり

—他—

—編集の都合により変更になる場合もございます—

書評

人はどのように鉄を作ってきたか

永田和宏 著

人類史上、「鉄」ほど人間社会や文明に深く関わってきた物質はない。本書は、鉄が発見された約4000年前から現代に至るまでの、製鉄法の変遷を概観した技術史書である。前半はヒッタイトによる製鉄法の発見から主にヨーロッパでの技術変遷が述べられ、中盤は日本古来のたたら製鉄法に関して詳述されている。後半では、昔の鉄中に不純物が少ない理由などが科学的見地から考察されており、最後に次世代製鉄法について著者見解で締めくくられている。

従来の技術史書は、

- 1) 遺跡や遺物調査などの産業考古学
- 2) 発掘遺物の再現を試みる実験考古学
- 3) 現代科学に基づき理論的な裏付けを与える理工学

や、或いは口伝・古文書(古文獻)調査などの歴史補助学的な立場から執筆されてきた。これらは各々に独自の学問体系が確立していて、領域を超えた調査や研究は行われて来なかった。その結果、ある側面は深く掘り下げられても、全貌を把握するには困難な場合が多々あった。

本書の特徴は、従来の切り口や立場に捉われないこと、製鉄法の変遷を総合的な見地から述べたところにある。そのため技術変遷

の過程が、容易に理解できる。

また帯の「温度計すらない時代に、人々は何を目安に鉄を作ってきたのか?」や、「現代の鉄は50年程度で朽ちてしまうのに、昔(法隆寺)の鉄は何故錆び難いのか?」といった興味深い疑問に対して、明快な回答が示されている。

本書は、講談社からブルーバックス刊で出版されている。ブルーバックスは、自然科学全般の話題を専門家ではない一般読者向けに解説するシリーズである。よって本書も、難解な金属学の事象が分かり易く執筆されている。

最後に本書は、製鉄法の変遷に関する単なる技術史書ではなく、物事の解明にあたる際の着眼の仕方、その実証のための理工学的手法など学ぶところも多い。さらに著者のモットーである「何事も楽しく行なう」姿勢が、随所に感じ取れる。

鉄の歴史に興味がある方に限らず、理工学系の学生にも是非一読をお勧めしたい一冊である。

(編)特殊金属エクセル 池田大亮

[2017年 新書版 講談社 ブルーバックス 254頁 1,000円+税]

新 入 会 員

(2017年5月23日～2017年6月20日)

正 員

安藤 怜	サンデン・アドバンステクノロジー株式会社	田中雄太	サンデン・オートモーティブコンポネント株式会社	松村大樹	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構
海老原健一	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構	張 雅 齡	国立研究開発法人物質・材料研究機構	村上義樹	日本リサイクルセンター株式会社
草野正大	物質・材料研究機構	塚根 亮	地方独立行政法人鳥取県産業技術センター	村上力輝斗	
合田義弘	東京工業大学	遠山文夫	株式会社キグチテクニクス	持丸昌己	オイレス工業株式会社
佐藤 悠	新日鐵住金株式会社	羽尻哲也	名古屋大学	LU XIN	東北大学
下野祐典	伊藤忠テクノソリューションズ株式会社	松崎雄高	日本リサイクルセンター株式会社		

学 生 員

青木拓也	宇都宮大学	大貫晋太郎	室蘭工業大学	小松拓弥	九州大学
赤間 稜	東北学院大学	大野佳祐	芝浦工業大学	小松尚徹	名古屋工業大学
朝倉直哉	大阪大学	大橋京平	名古屋工業大学	小柳裕一	東京理科大学
芦野秀治	大阪府立大学	大和田 奏	東北学院大学	齋藤豪太	東北学院大学
阿部圭史	仙台高等専門学校	岡野大幹	名古屋大学	齋藤真依	仙台高等専門学校
阿部真弓	東京工業大学	小川弘人	仙台高等専門学校	坂居貴雅	芝浦工業大学
阿部亮太	仙台高等専門学校	小倉 悠	大阪府立大学	境 七美	仙台高等専門学校
有里悠希	東京大学	小笹智也	富山大学	酒井雅生	金沢工業大学
有馬圭亮	大阪大学	小澤昂平	群馬大学	榊原 想	金沢大学
栗根昂也	兵庫県立大学	小田陽之	京都大学	坂戸将也	筑波大学
安澤佳希	群馬大学	小野寺暁理	東京工業大学	佐藤 奏	大阪府立大学
飯島正彦	富山大学	小宅智樹	岩手大学	佐藤 啓	東北学院大学
飯塚将俊	東北大学	柿沼 洋	東北大学	佐藤隆彦	芝浦工業大学
五百蔵一成	大阪府立大学	柏瀬早季子	東京工業大学	佐藤優斗	京都大学
池内岳仁	東京都市大学	數田久生	富山大学	佐村直樹	大阪大学
池田沙樹	久留米工業専門学校	片ノ坂聡人	九州大学	澤 源士郎	大阪大学
池田幸将	九州大学	加藤あおい	神戸大学	篠原重門	群馬大学
石島 響	東北大学	加藤 光	大阪府立大学	澁谷朋生	富山大学
石田 響	東北学院大学	加藤広基	東京工業大学	志摩知輝	室蘭工業大学
石塚 健	北海道大学	金谷涉平	宇都宮大学	庄司雄大	東北学院大学
石橋 淳	芝浦工業大学	金子大亮	横浜国立大学	生内幸亜	岩手大学
石原雅人	名古屋大学	金田智寛	九州工業大学	菅原 栞	仙台高等専門学校
板倉真博	千葉工業大学	金武泉希	大阪府立大学	杉本昌太	大阪大学
伊藤拓人	名古屋大学	上園秀哉	名古屋工業大学	鈴木滋人	仙台高等専門学校
井野翔太	名城大学	刈屋翔太	大阪大学	鈴木俊也	京都大学
井上晋太郎	北海道大学	川合泰貴	千葉工業大学	鈴木竜馬	筑波大学
猪股泰将	東京医科歯科大学	川野颯太	愛媛大学	世良田遼平	神戸大学
井村政仁	北海道大学	河原 魁	北海道大学	高坂祐一	兵庫県立大学
岩沢萌生	上智大学	河本明純	東京理科大学	高田桂佑	群馬大学
武 凱歌	東京大学	康 論基泰	株式会社放電精密加工研究所/芝浦工業大学	高増宣仁	東京工業大学
上杉哲平	大阪大学	木田潤一郎	東京理科大学	竹内慎修	中央大学
上野航太	上智大学	木下堪太	長岡技術科学大学	竹安崇一郎	名古屋大学
内田恭兵	兵庫県立大学	木村 匠	東京工業大学	田中風雅	北海道大学
梅村栄哉	東海大学	木村 萌	東北大学	丹下純平	大阪大学
梅山淳平	群馬工業高等専門学校	桐谷将史	金沢工業大学	段野芳和	大阪大学
占部航平	東京工業大学	國分雄太	東北大学	辻川航世	金沢大学
榎並武郎	熊本大学	久野孝平	名古屋大学	津田多公也	兵庫県立大学
榎本峻汰	室蘭工業大学	黒河哲哉	大阪大学	坪野祐介	東京工業大学
呉 鍾泳	大阪大学	黒木友偉	九州工業大学	鶴巻碩人	東北大学
大石達也	東京医科歯科大学	黒田 燎	東北大学	寺浦美咲	熊本大学
大島 優	名古屋大学	毛戸康隆	東京工業大学	東森 稜	京都大学
大杉有沙	富山大学	河野佳代	九州工業大学	富樫輝紀	苫小牧工業高等専門学校
大月健太	名古屋大学	後藤俊太	北海道大学	徳岡 聡	大阪大学
大槻晃平	群馬大学	小林駿介	大阪大学	内藤磨男	横浜国立大学
大手里奈	大阪府立大学	小林龍聖	群馬大学	永石武流	大阪大学

中城慎弥 熊本大学
 長野慎太郎 大阪大学
 永松洋一郎 東北大学
 成田賢人 岩手大学
 成田空知 岩手大学
 西野柁志 名古屋工業大学
 橋本直樹 東北大学
 濱口知也 三重大学
 浜野航貴 東京工業大学
 早川恭平 大阪大学
 林田岳 熊本大学
 原遼太朗 東京工業大学
 針木優太 大阪大学
 東山将士 九州工業大学
 兵頭由起 大阪府立大学
 福田健吾 大阪府立大学
 福森亮太 熊本大学
 藤井大輝 芝浦工業大学
 藤榮文博 名古屋大学
 藤田直輝 神戸大学
 藤原圭佑 九州大学
 藤原弘樹 大阪大学
 淵上誠吾 熊本大学
 船井浩平 大阪大学
 船田翔太 大阪府立大学
 古田智 大阪大学
 星野智顯 大阪府立大学
 堀切祐吾 東北大学

本間海人 室蘭工業大学
 増田万智子 富山大学
 増満勇人 鹿児島大学
 又井慎太郎 横浜国立大学
 松谷亮輔 東京工業大学
 松野直人 東北大学
 松原拓哉 大阪大学
 松本幸樹 大阪大学
 松本尚輝 茨城大学
 松本暢康 東北大学
 丸野大輔 九州大学
 三浦孝太 芝浦工業大学
 溝上慧祐 京都大学
 南久遠 神戸大学
 南慎一郎 神戸大学
 宮居秀地 神戸大学
 宮崎雅義 東京工業大学
 宮田将圭 富山大学
 妙智力也 東北大学
 村上真純 仙台高等専門学校
 村瀬颯登 京都大学
 村山真一 九州大学
 元木裕崇 大阪大学
 森竣祐 東北大学
 森谷一輝 東北学院大学
 諸隈湧気 群馬大学
 安富淳平 大阪大学
 安村駿治 大阪大学

柳寿明 芝浦工業大学
 山内啓介 茨城大学
 山口大輝 富山大学
 山崎俊二 鹿児島大学
 山崎輝真 九州大学
 山下晃司 熊本大学
 山田貴之 名古屋大学
 山戸正敏 兵庫県立大学
 山野花穂 東京工業大学
 山村祐樹 早稲田大学
 山本晴也 富山大学
 山本優也 室蘭工業大学
 行耕平 大阪大学
 横井雅輝 群馬大学
 横山麻人 上智大学
 横山和輝 富山大学
 吉岡拓矢 北海道大学
 吉田大哲 大阪大学
 渡邊一史 東北大学
 渡邊駿介 大阪大学
 渡邊那哉 秋田県立大学
 渡邊光 金沢大学
 渡邊将 東北大学
 渡邊遼 東北大学
 渡邊和来 苫小牧工業高等専門学校
 渡部哲平 芝浦工業大学

外国一般会員

Chandiran Elango 東北大学
 Chernenko Volodymyr
 BCMaterials & University of Basque Country
 GAUR Vidit 東京大学

KIM MYOUNGGYUN Research Institute of Industrial Science and Technology
 LEE Jein 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 PARK Induck
 Korea Institute of Machinery & Materials

ROGUSKA Agata 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 ウーリパティ 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 NIKULIN Ilya 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 魯園園 東北大学

外国学生会員

Bahador Abdollah 大阪大学
 BLEUSET Alexandre The University of Tokyo
 Han DongGean pukyoung national university
 TORUN Gozden 東北大学
 王望根 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 金鍾壹 室蘭工業大学

許勝 東北大学
 洪天倫 拓殖大学
 周欣依 大阪大学
 徐進 拓殖大学
 趙乙洋 富山大学
 趙燦 東北大学

ZHANG SHUZHE 足利工業大学
 陳嘉民 筑波大学
 杜興毅 拓殖大学
 南茜 東北大学
 楊佳明 東京大学



行事カレンダー

太字本会主催(ホームページ掲載)

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
8月				
4	第32回塑性加工シンポジウム「マルチマテリアル化を支える接合技術」(刈谷市)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 100名
4~6	第20回 XAFS 討論会(姫路)	日本 XAFS 研究会	TEL 0791-58-0833(3927) tamenori@spring8.or.jp	
6~8	第5回グリーンエネルギー材料のマルチスケール創製研究会(種子島)(7号469頁)	研究会 No. 71	TEL 022-795-7325 nobuaki.sekido.b7@tohoku.ac.jp	7.12
7	機械の日・機械週間記念行事(東大)	日本機械学会	TEL 03-5360-3505 kikainohi@jsme.or.jp http://www.jsme.or.jp/	
7~8	第65回 CVD 研究会(津)	CVD 研究会	TEL 075-383-2643 cvd@cheme.kyoto-u.ac.jp http://cvd.jpn.org/future/	7.24
7~8	第28回新構造・機能制御と傾斜機能材料シンポジウム(FGMs-2017)(名工大)	傾斜機能材料研究会	TEL 052-735-5293 fgms_sato@lab-ml.web.nitech.ac.jp http://www.fgms.net/	
17~19	2017年真空・表面科学合同講演会 第37回表面科学学術講演会・第58回真空に関する連合講演会(横浜市大)	日本表面科学会, 日本真空学会	taikai17@sss.org http://www.sss.org	
21	第24回高校課題研究フォーラム「高校でできるセラミックス実験」(日大)	日本セラミックス協会	TEL 03-3362-5231 cersj-kyoiku@cersj.org http://www.ceramic.or.jp/ikyoku/kadai_kenkyu_forum.html	定員 20名
21~22	金属第57回 鉄鋼第60回 中国四国支部講演大会(高知工科大)(6号410頁)	中国四国支部・新田(高知工科大)	nitta.noriko@kochi-tech.ac.jp	講演 6.16
22~23	第31回初心者のための疲労設計講習会(東京)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp	定員 60名
24~25	第81回半導体・集積回路技術シンポジウム(東京理科大)	電気化学会・電子材料委員会	TEL 03-3234-4213 semicon@electrochem.jp http://semicon.electrochem.jp/	事前参加 8.14
24~25	第9回役に立つ真空技術入門講座(大阪電気通信大)	日本真空学会関西支部	TEL 079-267-4922 shinku-kansai@prec.eng.osaka-u.ac.jp http://www.vacuum-jp.org/event/20170824	定員 100名
24~26	第11回インキュベーションホール(御殿場)	応用物理学会プラズマエレクトロニクス分科会	http://annex.jsap.or.jp/plasma/PE_files/PE_SS_2017/	定員 60名
25	第225回塑性加工技術セミナー「伸線(引抜き)加工の基礎技術」—伸線・引抜き・矯正・潤滑—(東海大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 200名
27~9.1	The 15th International Conference on Advanced Materials (IUMRS-ICAM2017)(京大)	日本 MRS	TEL 045-263-8538 meeting@iumrs-icam2017.org http://www.iumrs-icam2017.org/	
28	第389回講習会「感性指向の製品開発—ユーザー嗜好のトリセツ—」(東京理科大)	精密工学会	TEL 03-5226-5191 http://www.jspe.or.jp/	定員 60名
28~30	日本実験力学会2017年度年次講演会(東工大他)	日本実験力学会	TEL 025-368-9310 office-jsem@clg.niigata-u.ac.jp	
29	2017年度茨城講演会(茨城大学)	日本機械学会関東支部	TEL 0294-38-5278 ibakouen@ml.ibaraki.ac.jp	
29~31	平成29年度工学教育研究講演会(東京都大)	日本工学教育協会・川上	TEL 03-5442-1021 kawakami@jsee.or.jp https://www.jsee.or.jp/	5.8
29~9.1	第57回真空夏季大学(裾野)	日本真空学会	TEL 03-3431-4395 ofc-vs@vacuum-jp.org http://www.vacuum-jp.org/	7.28
30~31	第47回初心者のための有限要素法講習会(演習付き)(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	7.14
30~31	2017年度 JCOM 若手シンポジウム(岡山)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 JCOM2017wakate@jsms.jp http://compo.jsms.jp/	定員 40名
30~9.1	第152回塑性加工学講座「有限要素法入門セミナー」(名大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 27名
30~9.1	第40回結晶成長討論会(浜松)	日本結晶成長学会	TEL 070-5047-3339 jimukyoku@jacg.jp http://www.jacg.jp/jacg/japanese/frame_main/13/toronkai_40/index.html	
9月				
4~5	2017電気化学セミナー3「初心者のための電気化学測定法-実習編」(東京農工大)	電気化学会	TEL 03-3234-4213 ecsj@electrochem.jp http://electrochem.jp/promotion/index.html	8.21 定員 45名
4~5	SPring-8 シンポジウム2017 高性能化で目指すSPring-8の将来(広島大)	SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC)他	TEL 0791-58-2785 sp8sympo2017@spring8.or.jp http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2017/sp8sympo2017/	

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
5～6	第33回分析電子顕微鏡討論会(幕張メッセ)	日本顕微鏡学会	TEL 0774-38-3057/0774-38-3055 bunseki33@eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp http://eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp/ bunseki2017/	事前参加 8.29
6～7	第39回安全工学セミナー物質危険性講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
6～8	日本金属学会秋期講演大会(北海道大学)(札幌) (本号513頁)	日本金属学会	annualm@jim.or.jp TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312	事前参加 8.7
7～8	第8回「塗装入門講座」(東京)	日本塗装技術協会	TEL 03-6228-1711 tosou-jimukyoku@jcot.gr.jp http://jcot.gr.jp/	
8	第74回技術セミナー：非鉄金属材料の防食技術 —実用化金属の代表である銅・アルミニウム・チ タンの最新動向—(東京)	腐食防食学会	TEL 03-3815-1161 ysm.hng_113_0033@jcorr.or.jp	定員 70名
8	平成29年度秋季 全国大学材料関係教室協議会 講演会			
9	日本金属学会・日本鉄鋼協会男女共同参画委員会 10周年記念シンポジウム「企業・大学での女性活 用とダイバーシティ推進を考える」(北大)(本号 515頁)	ISIJ/JIM 男女共 同参画委員会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 gaffair@jim.or.jp	事前 8.21
12	関東支部講習会「金属材料強度試験法—より信頼 されるデータとは—」(東工大)(6号409頁)	関東支部・多賀 (東工大)	TEL 03-5734-3136 jim-kanto@mtl.titech.ac.jp	9.1
12～14	第226回塑性加工技術セミナー「はじめての塑性 力学(準備編・基礎編・応用編)」(芝浦工大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 90名
15	第77回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号 522頁)	レアメタル研究 会・宮崎(東大生 産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/ japanese/rc40_j.html	
16～18	第30回計算力学講演会(近畿大)	日本機械学会	cmdconf17@jsme.or.jp http://www.jsme.or.jp	
19～21	高温変形の組織ダイナミクス研究会「平成29年度 夏の学校」(蒲郡)(6号409頁)	研究会 No. 76・ 峯田(弘前大)	TEL/FAX 0172-39-3643 mineta@hirosaki-u.ac.jp	発表 7.21 参加 8.10
19～21	日本セラミックス協会第30回秋季シンポジウム (神戸大)	日本セラミックス 協会・山口	TEL 03-3362-5232 fall30@cersj.org http://www.ceramic.or.jp/ig-syuki/30th/	
20～21	第8回社会人のための表面科学ベーシック講座 (東京理科大)	日本表面科学会	TEL 03-3812-0266 shomu@sss.jp.org http://www.sss.jp.org	9.14
21～22	平成29年度軽金属基礎技術講座「アルミニウム の製造技術」(掛川)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 50名
22	第105シンポジウム「軽量化を実現する異種材料 接合技術」—軽金属材料と異種材料の複合化— (東工大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 80名
26～30	資源・素材&EARTH 2017(札幌)	資源・素材学会	info@mmij.or.jp	
27～28	第153回塑性加工学講座「板材成形の基礎と応用 ～応用編～」(大同大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 40名
28～29	平成29年度「デジタルラジオグラフィに関する 技術講習会」(東京)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/	定員 48名
28～30	第53回熱測定討論会(徳島大)	日本熱測定学会	TEL 03-5821-7120 netsu@mbd.nifty.com http://www.cats2017-53netsu.com/	
29	第323回塑性加工シンポジウム「IoTを活用した 未来のものづくりに向けて」(刈谷市)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 100名
10月				
2～3	平成29年度「デジタルラジオグラフィに関する 技術講習会」(大阪)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/	定員 48名
3	第69回白石記念講座「金属材料の弾塑性変形の マクロ・ミクロモデルの進歩」(早大)	日本鉄鋼協会・榎 岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mu0yiwlnlf	
5～6	金属・無機・有機材料の結晶方位解析と応用技術 研究会(下呂)(6号409頁)	研究会 No. 79・ 井上(大阪府立大)	TEL 072-254-9316 FAX 072-254-9912 inoue@mtr.osakafu-u.ac.jp	6.30
10～11	第6回フラクトグラフィ講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
10～14	第3回材料 WEEK(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
11～13	1st International Conference on Energy and Material Efficiency and CO ₂ Reduction in the Steel Industry (EMECCR2017)(神戸)	日本鉄鋼協会	emecr2017@issjp.com	
12	第1回EBSD法による損傷評価講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	8.25
12～13	第30回初心者のための疲労設計講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp	定員 40名

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
13	第15回 機械・構造物の強度設計, 安全性評価に関するシンポジウム(京都)	日本材料学会	FAX 075-761-5325 design15@jsms.jp/ http://www.jsms.jp/	講演 7.3
13~14	第12回材料の衝撃問題シンポジウム(京都)	日本材料学会	ymda@nda.ac.jp http://www.jsms.jp	
17~18	第64回表面科学基礎講座(阪大)	日本表面科学会	TEL 03-3812-0266 shomu@sss.org http://www.sss.org	10.11
18~19	第45回日本ガスタービン学会定期講演会(松山)	日本ガスタービン学会	TEL 03-3365-0095 gtsj-office@gtsj.org http://www.gtsj.org/	
18~19	第39回安全工学セミナー危険現象講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
18~20	ADMETA Plus 2017(Advanced Metallization Conference 2017: 27th Asian Session)(東大)	応用物理学会	TEL 03-6801-5685 jimukyoku@admeta.org	
20	第129回金属物性研究会「高温材料用金属材料の展望」(松江)	中国四国支部・森戸(島根大)	TEL 0852-32-6398 tatara@riko.shimane-u.ac.jp	9.28
20	早稲田大学各務記念材料技術研究所オープンセミナー(早大)	早稲田大学各務記念材料技術研究所	TEL 03-3203-4782 zaikenjimu@list.waseda.jp	10.13
25~27	第38回 超音波エレクトロニクス基礎と応用に関するシンポジウム(多賀城)	超音波エレクトロニクス協会	TEL 045-924-5598 onodera@iuse.or.jp http://www.use-jp.org/	講演 7.24
26~27	講習会「もう一度学ぶ機械材料学」—機械・製造技術者のための基礎講座—(東京)	日本機械学会	TEL 03-5360-3506 araki@jsme.or.jp http://www.jsme.or.jp/	
26~27	第53回 X線分析討論会(徳島大)	日本分析化学会 X線分析研究懇談会	TEL 088-656-7263 takashi-yamamoto.ias@tokushima-u.ac.jp http://web.ias.tokushima-u.ac.jp/xbun53/	事前参加 10.13
11月				
1~4	The 12th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics (12th ISEM '17-Kanazawa)	日本実験力学会	TEL 025-368-9310 office-jsem@clg.niigata-u.ac.jp www.jsem.jp	
2~6	第53回熱測定討論会と8th International and 10th Japan-China Joint Symposium on Calorimetry (CATS-2017)(福岡大)	日本熱測定学会	TEL 03-5821-7120 netsu@mbd.nifty.com http://www.cats2017-53netsu.com/	
4~5	軽金属学会第133回秋期大会(宇都宮大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	予約 10.5
5~10	第18回核融合炉材料国際会議(ICFRM-18)(青森)	第18回核融合炉材料国際会議	secretariat@icfrm-18.com http://www.icfrm-18.com/contacts.html	
5~10	第18回材料集合組織国際会議 18th International Conference on Textures of Materials (ICOTOM 18)(St George, Utah, USA)	ICOTOM 18・井上(大阪府立大)	TEL 072-254-9316 inoue@mtr.osakafu-u.ac.jp http://event.registerat.com/site/icotom2017	アブストラクト 2016.11.15
7	第231回西山記念技術講座「破壊力学」の進展とインフラ・構造物の信頼性～安全, 安心を管理するフラクチャー・コントロール～(東京)	日本鉄鋼協会・榎岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mubicwtwx	
7~9	第38回日本熱物性シンポジウム(つくば)	日本熱物性学会	TEL 03-5734-2435 jstp@op.titech.ac.jp http://jstp2017.org/index.html	事前参加 8.1
8~10	第64回材料と環境討論会(沖縄)	腐食防食学会	TEL 03-3815-1161 ysm.hng-113-0033@jcorr.or.jp	
8~10	第58回高压討論会(名大)	日本高压力学会	TEL 070-5658-7626 touronkai58@highpressure.jp http://www.highpressure.jp/new/58forum/	講演 7.3
8~10	第36回電子材料シンポジウム(EMS-36)(長浜)	電子材料シンポジウム運営・実行委員会	TEL 03-5841-7131 deura@dpe.mm.t.u-tokyo.ac.jp http://ems.jpn.org/	
10	平成29年度溶接工学専門講座 ものづくり力伝承講座～溶接プロセスの可視化を極める～(東京)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	定員 50名
10	第20回ミレニアム・サイエンスフォーラム(東京)	ミレニアム・サイエンス・フォーラム	TEL 03-6732-8966 msf@oxinst.com http://www.msforum.jp/	
10~11	第68回塑性加工連合講演会(福井)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	
12~16	第11回亜鉛および亜鉛合金めっき表面処理鋼板に関する国際学会(Galvatech2017) 11th International Conference on Zinc and Zinc Alloy Coated Steel Sheet (Galvatech2017)(東京)	GALVATECH2017事務局	TEL 03-5657-0777 galvatech2017@jtbcom.co.jp http://www.galvatech2017.jp/	
14~16	日本磁気科学会 第12回年会(京大)	日本磁気科学会	TEL 075-753-4723 MSSJ2017kyoto@gmail.com http://www.device.energy.kyoto-u.ac.jp/mssj12/index.html	
15~16	第39回安全工学セミナープラント安全講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
17	第1回機械材料・材料加工部門 若手ポスターシンポジウム(早稲田大)	日本機械学会	http://mp-poster.org/2017/	講演 8.31
17	第78回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号522頁)	レアメタル研究会・宮崎(東大生産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html	

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
20～21	平成29年度溶接入門講座(広島)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	定員 60名
20～24	Plasma Conference 2017(姫路)	応用物理学会他	TEL 052-735-3185 mnhmt@meijo-u.ac.jp	
27～28	第11回状態図・熱力学セミナー(名大)	日本学術振興会 産学協力研究委員会 合金状態図第 172委員会	abe.taichi@nims.go.jp	11.15 定員 40名
27～29	第46回結晶成長国内会議(JCCG-46)(浜松)	日本結晶成長学会	TEL 070-5047-3339 jaccg-46@jacg.jp http://www.jacg.jp/	
28	第232回西山記念技術講座「破壊力学」の進展と インフラ・構造物の信頼性～安全、安心を管理す るフラクチャー・コントロール～(大阪)	日本鉄鋼協会・楢 岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mubicwtwx	
12月				
3～8	第11回新物質及び新デバイスのための原子レベ ルキャラクタリゼーションに関する国際シンポジ ウム(ハワイ)	日本学術振興会マ イクロビームア ナリシス第141委員 会	alc17@jssps141.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp http://alc.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp/alc17/	
5～6	溶接構造シンポジウム2017「超スマート社会を 支える基盤溶接技術」(阪大)	溶接学会溶接構造 研究委員会	TEL 072-254-9345 http://www.jwri.osaka-u.ac.jp/~conf/ wmd2017/	
5～7	第43回固体イオニクス討論会(天童)	日本固体イオニク ス学会	TEL 022-795-6976 http://ceram.material.tohoku.ac.jp/ssij43/ ssij43-org@ceram.material.tohoku.ac.jp	事前参加 11.10
6～8	第44回炭素材料学会年会(桐生)	炭素材料学会	FAX 03-3368-2827 tanso-desk@bunken.co.jp	講演 8.21
7～9	第55回高温強度シンポジウム・第18回破壊力学 シンポジウム(熊本)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 http://www.jsms.jp/	講演 9.1
11～12	第14回ノートパソコンで出来る原子レベルのシ ミュレーション入門講習会～分子動力学計算と電 子状態計算～(大阪)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jim@jsms.jp http://www.jsms.jp	
14	第4回 初心者にもわかる信頼性工学入門セミ ナー(大阪)	日本材料学会	http://sinrai.jsms.jp/	
15～16	第30回記念信頼性シンポジウム-安心・安全を支 える信頼性工学の新展開(大阪)	日本材料学会	RESYMPO2017@jsms.jp http://sinrai.jsms.jp/	
2018年1月				
12	第79回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号 522頁)	レアメタル研究 会・宮崎(東大生 産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/ japanese/rc40_j.html	
15～16	第39回安全工学セミナー安全マネジメント講座 (東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
30～31	Mate 2018第24回「エレクトロニクスにおけるマ イクロ接合・実装技術」シンポジウム(横浜)	スマートプロセス 学会他	TEL 06-6878-5628 mate@sps-mste.jp http://sps-mste.jp/mate/	
2018年3月				
9	第80回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号 522頁)	レアメタル研究 会・宮崎(東大生 産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/ japanese/rc40_j.html	
19～21	千葉工業大学新習志野キャンパス(本年11号会告 予定)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 annualm@jim.or.jp	
2018年7月				
9～12	The 6th International Conference on the Charac terization and Control of Interfaces for High Qual ity Advanced Materials (ICCCI2018)(倉敷)	紛体工学会	TEL 045-339-3959 http://ceramics.ynu.ac.jp/iccci2018/ iccci2018@ml.ynu.ac.jp	
2018年8月				
5～8	15TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON FUNCTIONALLY GRADED MATERIALS —Structural Sector Approaches for New Func tionalities and Durability—(北九州)	傾斜機能材料研究 会	TEL 052-735-5293 fgms_2018@f-jast.or.jp http://www.fgms.net/isfgms2018	abstract 2018.1.20
2018年9月				
19～21	日本金属学会秋期講演大会(東北大学川内北キ ャンパス)	日本金属学会	annualm@jim.or.jp TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312	



まてりあ 第56巻(2017) 第3号 125頁~128頁
 創立80周年記念特集「古代上質鉄から発想を得た高耐食性 Fe-Cr 合金」

一色 実

下記の通り、表1中に誤字がありましたので、訂正いたします。

表1

(正) 薬師寺月光菩薩鉄心

(誤) 薬師寺学校菩薩鉄心

表1 各種古代鉄器の分析組成(mass ppm).

鉄器試料	Na	Al	Si*	S**	Ca*	Ti	Ti*	Cr*	Mn	Co*	Ni*	Cu	Cu*	Ga	As	In	W	非金属介在物中から 検出された元素
飛鳥時代の釘	8.9	46	39	24	120	<10	ND	<3	10	44	17	46	80	19	14	<0.8	4	Fe
法隆寺五重塔釘 (創建当初)	23	293	48	21	14	365	160	64	29	244	633	140	109	57	15	<0.2	<10	Fe, Ti, V, Cr
薬師寺学校菩薩 鉄心(奈良時代)	8.4	140	63	19	41	256	106	60	22	146	240	60	78	19	13	<0.5	<7	Fe, Ti, Mn, Al
鎌倉時代鑄鉄板	<3	20	33	120	14	<25	6	48	56	40	55	137	210	11	24	<0.4	5	
海住山寺塔鉄材 (鎌倉時代)	13	65	120	—	ND	<30	ND	30	11	89	39	27	23	11	11	<0.5	<0.4	Fe, Al, Si
姫路城かすがい (慶長年間)	7.8	45	31	—	25	<10	7	<3	2.5	72	102	209	140	79	56	<0.4	—	Fe, Ti, Mn, V

(*: 原子吸光分析, **: 川崎製鉄技術研究所依頼分析, 他は中性子放射化分析)



事務局からのお知らせ

- 永年会員制度についてお知らせしております(本号518頁)
- 「技術開発賞」「金属組織写真賞作品」募集はじまります。今年も多くのご応募をお待ちしております。

2017, 2018年度会報編集委員会 (五十音順, 敬称略)

委員長	山本剛久						
副委員長	大塚誠						
委員	赤瀬善太郎	足立望	安達正芳	池尾直子	池田賢一	石本卓也	
	上田恭介	梅津理恵	榎木勝徳	大野直子	大森俊洋	小幡亜希子	
	木口賢紀	北村一浩	高坂典晃	近藤亮太	齊藤敬高	榭浩司	
	佐々木秀顕	佐藤紘一	佐藤幸生	下島康嗣	杉浦夏子	杉田一樹	
	芹澤愛	高木成幸	竹田修	武田雅敏	田中智仁	田中秀明	
	田中康弘	田辺栄司	趙研	佃論志	堤祐介	寺井智之	
	寺西亮	寺本武司	土井康太郎	永井崇	長岡亨	中川鉄水	
	仲村龍介	野山義裕	萩沢武仁	長谷川誠	春本高志	本間智之	
	水本将之	宮崎秀俊	宮澤知孝	森田敏之	盛田元彰	森戸春彦	
	諸岡聡	山中謙太	横田智之	横山賢一	吉矢真人	吉年規治	
	李海文	和田武					

まてりあ 第56巻 第8号 (2017) 発行日 2017年8月1日 定価(本体1,700円+税)送料120円
 年間機関購読料金52,400円(税・送料込)

発行所 公益社団法人日本金属学会 発行人 山村英明
 〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32 印刷所 小宮山印刷工業株式会社
 TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 発売所 丸善雄松堂株式会社
 〒105-0022 東京都港区海岸 1-9-18

Materials Transactions 投稿の手引き

Materials Transactions (Mater. Trans.)への投稿は、次の要件を満たさなければならない。

- (1) 英文であり、未掲載および他のジャーナルに投稿中でないことかつオリジナリティがあること (Materials Transactions 審査及び査読規程に定める範囲において、重複を認める場合がある)。
- (2) 金属とその関連材料の学術および科学技術の発展に寄与するものであること。
- (3) 投稿規程に合致するものであること。
- (4) 別に定める執筆要領に準拠して作成された原稿であること。
- (5) 論文の著作権を本会に帰属することに同意すること。
- (6) 掲載が決定した場合は、この規程に定める投稿・掲載料を支払うこと。
- (7) 研究不正行為および研究不適切行為をしないことならびに研究不正行為をした場合は本会の定めるところにより処分を、研究不適切行為をした場合は本会の定めるところにより措置を受けることに同意すること。
- (8) 投稿原稿を作成する基となった生データ、実験・観察・研究ノート、実験試料・試薬等の研究成果の事後の検証を可能とするものを論文掲載後5年間保存することに同意すること。

1. Mater. Trans. に投稿可能な論文

(1) Regular Article (10頁以内)

金属及びその関連材料の理論、実験並びに技術などに関する学術上の成果を報告し、考察した原著論文で、科学・技術的に質の高い、新規な興味ある内容(結果、理論、手法等)が十分含まれている論文。ただし、日本金属学会誌に Web 掲載後1年以内であれば投稿ができる。その事を脚注に明記する。また、日本金属学会誌と異なる部分がある場合、その事を脚注に明記する。なお、著者が迅速掲載を希望し、追加費用を負担する場合は、査読期間短縮を含め迅速掲載のための処理を行う。

(2) Review (15頁以内)

各専門分野の研究開発の背景や最近の状況及び今後の展望等について、重要な文献を引用して、各専門分野の専門家のみならず他分野の専門家や学生等も対象に、その概要を公正にかつわかりやすく解説する論文。日本金属学会誌およびまてりあに Web 掲載後1年以内であれば投稿ができる。その事を脚注に明記する。また、日本金属学会誌およびまてりあ掲載論文と異なる部分がある場合は、その事を脚注に明記する。

(3) Overview (15頁以内)

単なる一般的な review ではなく、執筆者独自の考えに立って review し、取り上げた問題点の中において自説の位置付けを明確にした論文。ただし、事前に「タイトル」「氏名」「要旨」を編集委員会に提出し、了承を得た後、投稿する方式とする。日本金属学会誌およびまてりあに Web 掲載後1年以内であれば投稿ができる。その事を脚注に明記する。また、日本金属学会誌およびまてりあ掲載論文と異なる部分がある場合は、その事を脚注に明記する。

(4) Technical Article (10頁以内)

金属およびその関連材料の実験技術、製造技術、設備技術、利用技術など、技術上の成果、基準、標準化、データベースなど、および関連する事柄の調査、試験結果を報告した原著論文。ただし、日本金属学会誌に Web 掲載後1年以内であれば投稿ができる。その事を脚注に明記する。また、日本金属学会誌と異なる部分がある場合は、その事を脚注に明記する。

(5) Rapid Publication (4頁以内)

特に速報する価値のある短い論文。すなわち、新規性のある顕著な研究成果、技術開発に関する新知見、新アイデア、提案等。

(6) Express Rapid Publication (3頁以内)

Rapid Publication より緊急性が高く、迅速な発表のための特別な処理を必要とする論文。他の発表論文より迅速掲載のため、より緻密性と完成度が求められる。迅速掲載のための費用を追加負担しなければならない。

(7) Opinion (2頁以内)

Materials Transactions に掲載された論文に対する意見、討論またはそれに対する著者からの回答とする。科学・技術的な発展に貢献できる内容であること。

(8) その他理事会で決議した分類

2. 投稿の方法

Web 上で登録を済ませてから、自動返信メールに記載の指示に従って原稿を提出する。

3. 原稿

執筆要領に従って原稿を作成し指定のファイル形式に変換したものもしくはハードコピーを提出する。

3.1 記載内容

①題目・著者名・研究機関、②英文概要・Keywords、③本文、④謝辞、⑤文献、⑥Appendix、⑦表・図説明一覧、⑧その後に各別紙の表・図を添付する。

3.2 単位

SI 単位を使用する。

3.3 引用文献・脚注

通し番号で^{1,2)}、あるいは³⁻⁶⁾のように表し、本文の末尾に一括記載する。著者名、誌名はすべて英語表記する(特に決まっていなものはローマ字表記する)。

4. 審査

投稿された論文は欧文誌編集委員会の独自の審査を経て欧文誌に掲載される。編集委員会から原稿の修正を求められ、あるいは返却されることがある。

5. 校正

初校は著者の責任で行う。著者校正は原則として1回とし、誤植の修正に限る。

6. 投稿者負担金

6.1 投稿・掲載費用を支払う(別刷50部寄贈)。

6.2 カラー図掲載を希望する場合は実費を負担する。

(刷上り1頁当り35,000円)

※オンラインジャーナルと冊子は、同じ色の図が掲載される(オンラインジャーナルのみカラー表示はしない)。

6.3 Regular Article の迅速掲載費用：1万円。

6.4 Express Rapid publication 掲載費用：3頁以内一律5万円。

公益社団法人日本金属学会
欧文誌編集委員会

ALLOYS & METALS

品名	純度	形状	品名	純度	形状	品名	純度	形状
純金			高純度金属			中間合金		
高純度アルミニウム	99.99%	約1kgインゴット	アルミニウム	99.999%	粒状100g入	銅	P>14.5%	粒状
アルミニウム	>99.7%	〃	アルミニウム	〃	約100g塊	シリコン	Si 15%	約1kgインゴット
アルミニウム粒	99.99%	粒状1kg入	銀	99.999%	粒状	マンガン	Mn 25%	〃
アルミニウム粉	99.7%	粉末	ビスマス	99.9999%	粒状100g入	マグネシウム	Mg 50%	約800gインゴット
銀	99.99%	粒状	ビスマス	〃	約100g塊	クロム	Cr 10%	約1kgインゴット
ボロンクリスタル	99.4%	3~8mm小塊	高純度クロム(4N5)	99.995%	薄片状	テルル	Te 50%	〃
ボロンアモルファス	95~97%	粉末	無酸素銅	99.99%	10×10×1mm	コバルト	Co 10%	〃
ビスマス	99.99%	針状	鉄(マイロンSHP)	99.99%	25×25×2mm	ニッケル	Ni 30%	〃
コバルト粒(ロシア産)	99.3%	粒状	ガリウム	99.9999%	粒状25g入	鉄	Fe 10%	〃
電解コバルト(従来品)	99.9%	フレーク状	ゲルマニウム	99.999%	約50g塊	チタン	Ti 25%	〃
電解コバルト(FB)	99.9%	約25×25×10mm	インジウム	99.999%	粒状100g入	ジルコニウム	Zr 50%	〃
金属クロム	99%	塊状	インジウム	〃	約100g塊	ボロン	B 2%	粒状
電解クロム	99%	薄片状	マンガン	99.999%	薄片状	アルミ	Cu 40%	約5~7kgインゴット
クロム粉	99%	粉末500g入	錫	99.999%	粒状100g入	アルミマグネシウム	Mg 20%	約2kgインゴット
電気銅	99.99%	約25×50×10mm	錫	〃	約100g塊	アルミマンガン	Mn 10%	約5kgインゴット
電解鉄(アトミロンMP)	99.9%	小片状25kg入	アンチモン	99.9999%	粒状100g入	アルミニウム	Ni 20%	〃
電解鉄(アトミロンYL)	〃	〃	アンチモン	〃	約100g塊	アルミニウム	Cr 5%	〃
電解鉄(アトミロンFP)	〃	〃	テレル	99.9999%	約100g塊	アルミチタン	Ti 5%	約4~5kgインゴット
電解鉄(アトミロンXL)	〃	〃	ル	〃	約100g塊	アルミシリコン	Si 25%	〃
電解鉄粉	99%	粉末1kg入	亜鉛	99.999%	約100g塊	アルミコバルト	Co 5%	〃
ハフニウム	99.8%	スポンジ小塊	鉛	〃	約100g塊	アルミモリブデン	Mo 5%	〃
インジウム	99.99%	塊状	鉛	99.9999%	粒状100g入	アルミタングステン	W 2.5%	〃
マグネシウム	99.9%	約200g塊	亜鉛	〃	約100g塊	アルミベリリウム	Be 2.5%	約50gインゴット
電解マンガン	99.9%	薄片状	亜鉛	〃	約100g塊	アルミニウム	Fe 50%	塊状
モリブデン粉	99.9%	粉末	亜鉛	〃	約100g塊	アルミボロン	Zr 5%	約5kgインゴット
ニオブグラニュー	99.9%	3~10mm小塊	チ	99.9%	5φ×150mm	アルミバナジウム	B 4%	約200gインゴット
ニオブ粉	〃	粉末	レアアースメタル			アルミストロンチウム	V 50%	小塊状
電気ニッケル	99.99%	25×25×10mm	イットリウム	99.9%	塊状、削状、粉状	アルミカルシウム	Sr 10%	約100gインゴット
ニッケルペレット	99.97%	6~12mm球状	ランタン	〃	〃	ニッケルボロン	Ca 10%	約2.5kgインゴット
レニウム粉	99.99%	粉末	プラセオジウム	〃	〃	ニッケルニオブ	B 15%	塊状
ルテニウム粉	99.9%	〃	ネオジウム	〃	〃	ニッケルマグネシウム	Nb 60%	〃
アンチモン	99.9%	塊状	サマリウム	〃	〃	コバルトボロン	Mg 50%	約1.5kgインゴット
金属シリコン	99%	〃	イッテルビウム	〃	〃	ホルミウム	B 15%	塊状
錫	99.99%	約1kgインゴット	テルビウム	〃	〃	エルビウム	Nb 60%	〃
タantal塊	99.9%	3~10mm小塊	ジスプロシウム	〃	〃	ガドリニウム	Mg 50%	約1.5kgインゴット
タantal粉	〃	粉末	ホルミウム	〃	〃	ツリウム	B 15%	塊状
テルル	99.99%	小球状	エルビウム	〃	〃	ルテチウム	Nb 60%	〃
スポンジチタン	99.7%	スポンジ塊	ガドリニウム	〃	〃	セリウム	Mg 50%	約1.5kgインゴット
チタン板	JIS 1種	250×250×1mm	ツリウム	〃	〃	ユーロピウム	B 15%	塊状
バナジウム	99.7%	3~10mm小塊	ルテチウム	〃	〃	ミッシュメタル	P 5%	インゴット
バナジウム粉	〃	粉末	セリウム	〃	塊状のみ	ウアロイ	融点47±2℃	約500gインゴット
タングステン粉	99.9%	〃	ユーロピウム	〃	〃	ウアロイ	60±2℃	〃
タングステンクラップ	99%	板状	フェロアロイ	TRE>97%	5.4φ×6mm 200g入	ウアロイ	70±2℃	〃
亜鉛	99.99%	約2kgインゴット	フェロモリブデン	Mo 60%	塊状	ウアロイ	78.8±2℃	〃
亜鉛粒	〃	粒状	フェロニオブ	Nb 60%	〃	ウアロイ	91.5±2℃	〃
ジルコニウム	>99.5%	スポンジ塊	フェロバナジウム	V 80%	〃	ウアロイ	95±2℃	〃
			フェロボロン	B 20%	〃	ウアロイ	100±2℃	〃
			カルシウムシリコン	Ca30%Si60%	小塊状	ウアロイ	124±2℃	〃
						ウアロイ	150±2℃	〃

お問い合わせは、必ず下記事項をご記入の上、FAXしてください。

「社名」または「大学名」、および「所属と名前」、個人の方は「名前」
「郵便番号・住所・電話・FAX」・「商品名・純度・形状・希望数量」
見積・注文でお急ぎの場合は「至急」と明記して下さい。

FAX (03)
3294-9336

株式会社 平野清左衛門商店
〒101-0047 東京都千代田区内神田1丁目5番2号 TEL(03) 3292-0811

- 土曜・日曜・祭日休業
- 手形取引はいたしません
- 輸出はせず国内取引のみ

超高温・高速昇温・真空・ガス雰囲気中試料の加熱に!

超高温スーパーRTA装置 SR1800G

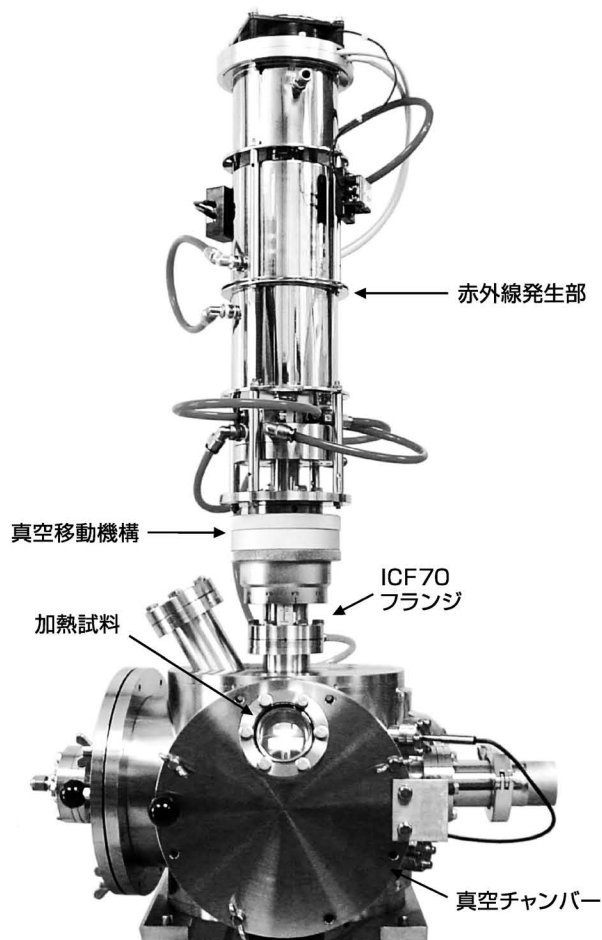
- ◆超高速昇温 1800℃まで1分以内
- ◆真空、ガスパージ、ガスフロー中熱処理
- ◆赤外線ランプ電力 わずか2kW
- ◆操作性の向上、低価格の新製品!



ラビットアニール赤外線導入加熱システム GV2

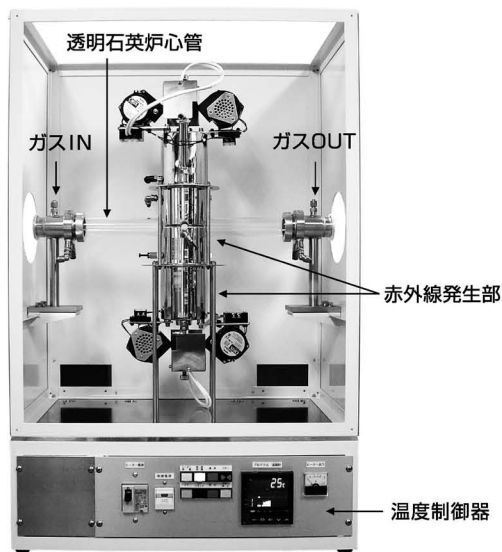
赤外線導入本体部、マルチポート真空チャンバー、温度制御器等で構成され、高真空中試料の超高速昇温ができます。ポートが多く、多様な実験、クリーン加熱が可能です。真空チャンバー前面扉の開閉により試料を出し入れできます。

- ◆最高到達温度 1500℃
- ◆到達真空度 5×10^{-5} Pa
- ◆試料表面急速加熱
- ◆裏面強制冷却 (オプション)




対面照射式 赤外線真空炉 IVF298CV

- ◆超高温・超高速熱処理
- ◆立体状試料も均一加熱
- ◆ヒートサイクル試験可能
- ◆4kWの電力で1700℃



★日本金属学会付設展示会 (北海道大学)
2017年9月6日~8日 出展

35th Anniversary

 株式会社 サーマ理工

〒181-0013
東京都三鷹市下連雀8-7-3 三鷹ハイテクセンター
TEL.0422-76-2511 FAX.0422-76-2514
<http://thermo-r.co.jp/> ホームページリニューアル

HP・お問合せ



高純度 GfG

汚れや飛散のないカーボン材料

最高温度2,800℃

純度5PPM以下

■真空、高温炉内材料一式

■炉内部品取替工事

■炭素繊維高温材料

- カーボンヒーター
- 炭素繊維断熱材
- 炉内サポート治具
- 機械用カーボン
- 連続鑄造ノズル
- ホットゾーン改修工事



メカニカルカーボン工業株式会社

本社・工場：〒247-0061 神奈川県鎌倉市台 5-3-25 TEL.0467(45)0101 FAX.0467(43)1680代
 事業所：東京 03(5733)8601 大阪 06(6586)4411 福岡 092(626)8745
 周南 0834(82)0311 松山 0899(72)4860 郡山 024(962)9155
 工場：広見工場 0895(46)0250 野村工場 0894(72)3625 新潟工場 0254(44)1185
<http://www.mechanical-carbon.co.jp> E-mail: mck@mechanical-carbon.co.jp

試験雰囲気ガス中の酸素濃度のコントロール・測定に!!

高濃度 (10^5 PaO_2) から極低濃度 (10^{-25} PaO_2) まで酸素をコントロール測定します。

酸素分圧 & 雰囲気制御試験炉



NEW

管状炉付酸素分圧
コントローラー

SiOAF-200C

- 簡便な GUI によりタッチパネル、ネットワーク、PC から容易に温度、雰囲気、酸素分圧等のプログラムパターン運転が可能です。
- 酸素分圧コントロールユニット (オプション) の付加により高濃度 (10^5 Pa) から極低濃度 (10^{-25} Pa) までの酸素分圧を制御できます。
- 最大3ガス種までの雰囲気ガスを接続し、任意のタイムプログラムにて雰囲気調整できます。
- 均熱長 120mm / 1ゾーン制御炉から均熱長 300mm の3ゾーン制御炉まで対応できます。

SiOC-200CB
(循環型)



酸素分圧コントローラー

- 本装置はジルコニア式酸素ポンプに不活性ガスを流し、ガス中の酸素濃度を制御します。
- 酸素濃度のコントロールは酸素ポンプと酸素センサーを組み合わせた PID 式フィードバック回路により制御されます。
- 不活性ガス中の酸素濃度は $10^5 \sim 10^{-25} \text{ PaO}_2$ (タイプ C 循環式) の範囲で制御します。

特注品(流量、試料処理部付/イメージ炉、真空チャンバー)などにも対応します。

SiOS-200C
(コンパクトタイプ)



高感度酸素センサー

- 極低酸素分圧領域 $10^5 \sim 10^{-25} \text{ Pa}$ における研究開発に使用できます。
- 高分解能測定回路の採用により、測定レンジの切替をせずに、広範囲酸素分圧をダイレクト測定できます。
- 測定ガスサンプリングポンプを付属したタイプ (SiOS-200P) も揃えています。

走査型オージェ電子分光分析装置 Auger Electron Spectroscopy

PHI 710 *Scanning Auger Nanoprobe*



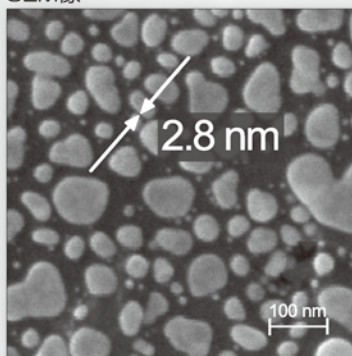
CMA 型 AES

- 高感度・高スループット分析
- 電流値 1 nA (オージェ分析可能) で AES 分解能 ≤ 8 nm
- 高エネルギー分解能測定 (CMA 使用)



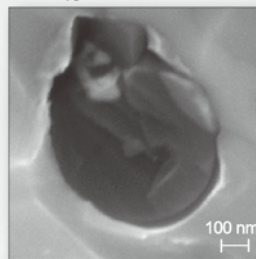
SEM 分解能 ≤ 3 nm, AES 分解能 ≤ 8 nm

SEM像

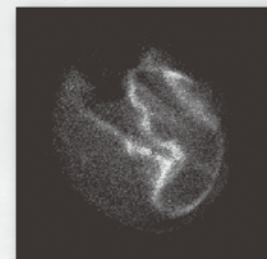


グラファイト上の金粒子における SEM分解能測定 (25 kV 0.2 nA)

SEM像



Sのオージェマップ



ダクタイル鋳鉄断面の粒界介在物の分析

アルバック・ファイ株式会社

本社・工場 〒253-8522 茅ヶ崎市田蔵370番地 TEL: 0467-85-4220 (国内営業部) FAX: 0467-85-4411
大阪営業所 〒532-0003 大阪市淀川区宮原3-3-31 上村ニッセイビル5階 TEL: 06-6350-2670 FAX: 06-6350-2980

<https://www.ulvac-phi.com>