



## 分子／結晶模型モデル (組み立て用キット)

プラスチックの原子と結合を使った教育学習用の分子／結晶構造の模型です。原子は色で区別され、正しい角度に設定された分枝を持ち、決められた長さの結合長で繋ぎ合わされます。直径1cmと6mmの原子を使う2種類のモデルサイズがあります。

### 基本セット

■Basic Structure (1cmモデル) Class Set ¥11,000.-  
硫酸、塩化ナトリウム、ダイヤモンド、グラファイト、金属、酸と塩基、洗剤、ナイロン、アモルファス構造の学習用(原子515個)

■Lattice (1cmモデル) Class Set ¥11,550.-  
ダイヤモンド、グラファイト、塩化ナトリウム、8および12配位金属、塩化セシウム、セ閃亜鉛鉱、ウルツ鉱、ルチル、氷構造の学習用(原子380個)

■Organic and Inorganic Chemistry (1cmモデル) Class Set ¥9,680.-  
アルカン、アルケン、アルキン、環構造、酸素／窒素／硫黄／リンの官能基、ベンゼン環、ポリマー、複素結晶の学習用(原子500個)



### 結晶セット

■Carbon Nanotube (原子150個) ¥3,410.-

■Diamond (原子450個) ¥7,700.-

■Beta-Quartz (原子1,400個) ¥14,960.-

■Mica (原子1,550個) ¥27,720.- その他、多数あり

(製作: Cochranes of Oxford Ltd.)

化学プロセス用の物性データベース

## DIPPR with DIADEM pro (Design Institute for Physical Property Data)

価格 ¥385,000.-/¥66,000.- (一般/教育)

2,280化合物についての49種類の熱物性値(実測値)、複数の推算式、原文献データと15種類の温度依存物性には推算式の係数などのデータベースです。AIChE推奨のインターフェイスソフトウェア(DIADEM)付きのスタンドアロンシステムです。

### おもな機能(DIADEM)

■検索対象: Name, Formula, CAS番号、物性データ

■物性値: 実測値、推算式による予測値

■データ表示: テーブルとグラフプロット

■複数化合物データの重ね合わせプロット

■MDL Chimeプラグインによる構造的立体表示

■ユーザーデータベースの作成



システムプラットフォーム:  
Windows 8/10 (AIChE DIPPR Project 801)

## 30,000件のセラミックス状態図データベース Phase Equilibria Diagrams, Version 5.0 (ACerS-NIST)

新規購入価格 ¥319,000.-

(シングルユーザー用/マルチユーザー用)

Version 4.1/4.2/4.3/4.4/4.5からのアップグレード価格あり(¥160,000~¥50,000)

### 検索条件

■元素記号、成分系 ■著者名、出典書誌名、出版年 ■状態図番号

### 収録物質系

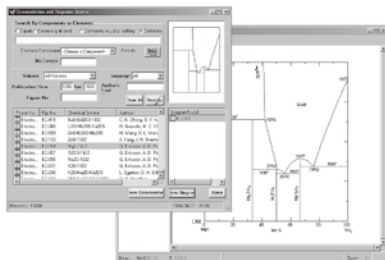
■酸化物とその混合系 ■カルコゲナイド(硫化物、セレン化物、テルリド)

■ニチド類(第15族元素) ■炭化物類、炭酸塩類、ケイ化物類、ケイ酸塩類

■アクチノイドおよび希土類 ■-semiconductors ■第3族元素 ■塩類とその混合系

データソース/Phase Diagrams for Ceramists他の1898年以降のACerSとNISTの刊行物

\*Version 5ではすべての図がPDFで収録され、このバージョンではJAVAは不要です。

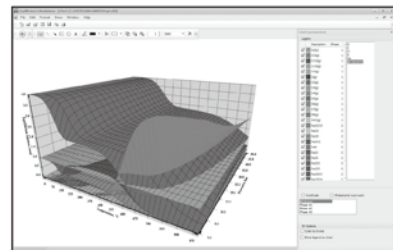


システム要件: Windows 7~10、2GB RAM、ディスク空き容量4GB 媒体: USB

## 化学反応/平衡計算ソフトウェア HSC Chemistry for Windows, Ver.10.x

年間使用料 ¥319,000.-/¥110,000.- (一般/教育)

約28,000種についてのエンタルピー、エントロピー、熱容量のデータベースを基に化学反応の計算やGIBBSまたはSOLGASMIXのルーチンによる化学平衡を計算します。反応、熱平衡、分子量計算などの一般的なモジュールの他、電気化学セル平衡と相安定性、腐食の研究に使われるEh-pH(プルベ)状態図の作成などユニークなモジュールを持ち合わせています。計算結果のテーブルと状態図はクリップボードにコピーできます。SIM Flowsheetモジュールもあり、複数のユニットプロセスからなるプロセス全体のシミュレーションとモデリングができます。



システムプラットフォーム: Windows /8/10  
(Autototec Research Oy. 製作)

※表記の価格は税込です。

## 株式会社 デジタルデータマネジメント

東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル 〒103-0025

TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772 <http://www.ddmcorp.com>

9

2022  
Vol.61  
No.9

まてりあ

金属素描 No. 24 レニウム(Rhenium) 八木良平……………539

## 特集「ミルフィーユ材料における多様なキンク現象」

企画にあたって

井田駿太郎 鈴木真由美 高島克利 寺本武司 長谷川 誠 松本洋明 眞山 剛……………541

LPSO 型 Mg 合金のキンク形成観察とキンク導入加工プロセスの最適化

光原昌寿 山崎重人 安藤大輔……………543

3 大材料におけるキンク変形帯の微視的構造 江草大佑 戸木田雅利 阿部英司 ……550

キンク形成とキンク強化の結晶塑性解析 眞山 剛 只野裕一……………558

幾何学的理論に基づくキンク変形のモデリングと解析 稲邑朋也 垂水竜一 ……563

ミルフィーユ構造を有する高密度ポリエチレン結晶の高強度化メカニズム

斎藤 拓……………569

MAX 相セラミックス  $Ti_3SiC_2$  焼結体におけるキンク変形とキンク強化の可能性について 池田賢一 ……572

Ti 基合金におけるミルフィーユ構造の形成とキンク帯導入への展開

江村 聡……………576

解説

先端材料開発に向けた、AI 先端計測技術の多角的視点からの考察(第 2 回)

岡本和也 杉山昌章 武藤俊介 青柳里果 富谷茂隆……………579

先端計測技術と人工知能・機械学習の融合による将来の姿を考察する第 2 回。機能の動的変化を時間発展的に見る「オペランド計測」とスペクトルピークの多様性を数値化できる「情報エントロピー計測」、そして本領域の産業的価値にも言及。

講義ノート

平面波基底の第一原理計算法(第一回) 香山正憲……………588

第一原理計算の汎用コードで用いられる「平面波基底の第一原理計算法」の原理、概要、計算技術を、総合的に、わかりやすく講義。重要な式の展開も丁寧に記述。従来のテキストにない部分も説明。四回連載。

先達からのお便り

縁は研究を結ぶ 里 達雄……………595

思い出の教科書、この一冊!

英語で書く科学・技術論文 谷口滋次・田中敏宏・飯田孝道・J. D. Cox(著) 袴田昌高 ……599

本会記事

会告……………600 日本金属学会オンライン教育講座……………615

支部行事……………607 新入会員……………620

2023年度講演大会委員候補者推薦のお願い……………608 会誌・欧文誌 9 号目次……………622

掲示板……………612 次号予告……………622

金属学会セミナー(特別講座)……………614 行事カレンダー……………623

付録

2022年秋期講演大会プログラム……………別冊

【今月の表紙写真】 LPSO 型 Mg 合金より取得した HAADF-STEM 像。(江草大佑 戸木田雅利 阿部英司 著 551頁 図 1(b)より掲載)

表紙デザイン: ビーコン コミュニケーションズ株式会社 グラフィックスタジオ

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っては、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。



# 「化学」分野

#素材

#生命・環境

#応用化学

# 専門技術者

# 募集

知財経験  
不問

高度な  
専門性

社会的  
貢献

技術経験・  
知識の活用

# IPCC

業界  
最大手

最先端の  
技術

Professional  
Team\*

\*Ph.D 約150名が在籍

## ☆IPCCは、特許庁の登録調査機関です！

特許審査に必要な特許文献調査及び特許出願等への分類付与業務を行う  
専門技術者を募集しています。

IPCC 専門技術者



※ 処遇、募集技術分野等の詳細についてはHP参照



## ※化学部門では以下の技術分野で募集中。その他機械部門、電気部門など全技術区分でも募集中。

- 【区分20】 無機化学(触媒、無機化合物、蒸着・単結晶成長、コンクリート、セラミックス、ガラス等)
- 【区分21】 金属・金属加工(精錬・鑄造・圧延、合金製造、熱処理・炉、合金・溶接材料、表面処理等)
- 【区分22】 電気化学(燃料電池システム、電極、活物質、リチウム電池、アルカリ電池、燃料電池、電線、電線の製造等)
- 【区分24】 生命工学・医療(化合物含有医薬、蛋白・抗原抗体含有医薬、製剤・医療材料、バイオテクノロジー等)
- 【区分25】 有機化学(有機化合物の製法、農薬・染料、石油化学、応用有機材料、インク、接着剤、固体廃棄物等)
- 【区分26】 環境化学(膜、水処理、固体分離、濾過・液分離、排ガス、処理操作一般、混合等)
- 【区分27】 プラスチック工学(高分子処理、樹脂成形、タイヤ、発泡成形等)
- 【区分28】 高分子(縮合系高分子(熱可燃系、熱硬化系)、付加系高分子(特殊)、高分子組成物、重合・触媒等)
- 【区分29】 繊維・積層体(繊維、積層体、塗装、皮革、紙等)
- 【区分30】 有機化合物(有機化合物、医薬等)

# IPCC

一般財団法人  
工業所有権協力センター  
Industrial Property Cooperation Center

〒135-0042 東京都江東区木場一丁目2番15号

深川ギャザリア ウェスト3棟

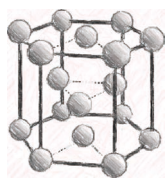
採用担当: 人材開発センター 開発部 採用課

TEL 03-6665-7852 FAX 03-6665-7886

URL <https://www.ipcc.or.jp/>

e-mail : [ipcc-jin@ipcc.or.jp](mailto:ipcc-jin@ipcc.or.jp)

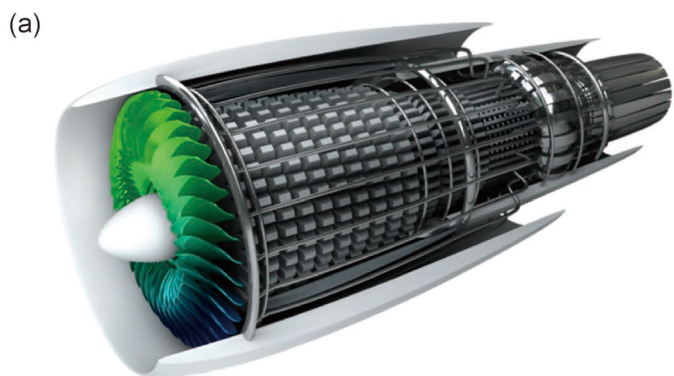




## シリーズ「金属素描」

# No. 24 レニウム (Rhenium)

東京大学 生産技術研究所 八木良平



元素名：Rhenium，原子番号：75，原子量：186.2，電子配置：[Xe] 4f<sup>14</sup>5d<sup>5</sup>6s<sup>2</sup>，密度：21.023 Mg·m<sup>-3</sup>(299 K)，結晶構造：最密六方晶，融点：3453 K，沸点：5900 K<sup>(1)</sup>，地殻存在量：0.188 ng·g<sup>-1</sup><sup>(2)</sup>【写真】(a) レニウムを含むニッケル基超合金を使用したジェットタービン概略図，(b) レニウムペレット(Umicore S.A. 提供)。

ドイツの Walter Noddack と Ida Tacke および Otto Berg は1925年に75番元素の発見を報告し，ライン河(ドイツ語：Rhein)にちなみレニウム(Rhenium, Re)と命名した<sup>(3)</sup>。レニウムの発見以降，種々の鉱石からの製錬法が開発されたが，現在では，モリブデン精鉱の酸化焙焼工程において発生する炉排ガスの洗浄液からレニウムを回収・精製し，過レニウム酸アンモニウム(APR)として晶析させ，水素還元して金属レニウムを得る手法が最も工業利用されている<sup>(4)</sup>。

レニウムの融点は 3453 K で金属元素の中ではタングステン(3653 K)の次に高い。また，密度も 21.0 g·cm<sup>-3</sup> と大きく，オスミウム，イリジウム，白金に次いで高い。室温での弾性率も 465 GPa と大きく，温度による延性-脆性遷移を起こさず，また，高温でも強度と延性を失わない点も特徴である<sup>(3)(4)</sup>。高い融点と高温耐久性で知られるレニウムであるが，金属レニウムは高温酸化雰囲気において酸化し，生成した Re<sub>2</sub>O<sub>7</sub> や ReO<sub>3</sub> などの酸化物は 1000 K 以下でも容易に揮発するため，高温で優れた機械的強度を発揮させるには金属やセラミックスでのコーティング処理が必要となる。

レニウムは地殻中含量が 0.2 mass ppb 以下の極めて稀少な金属であり，近年の鉱石からのレニウムの生産量はわずか年間約 50 t である。さらに，レニウムは銅やモリブデンの副産物として限られた量しか生産されず，産出国はチリやアメリカなどの特定の国に大きく偏っている。このため，レニウムは需要に応じて供給を調整することが難しく，供給障害や価格高騰のリスクを常に有している<sup>(4)</sup>。

世界では年間約 75 t のレニウムが消費されており(2018年)，その約80%は，ニッケル基超合金の添加元素として用いられる<sup>(5)</sup>。ニッケル基超合金は高温における優れた耐酸化性および機械的強度を有し，航空機のジェットエンジンや発電所のガスタービンの高圧タービンブレードなどに用いられている。超合金には種々の元素が添加されているが，それらの中でもレニウムの添加は，超合金母相を固溶強化し高温強度を高める効果があり，現在のタービン用超合金製造に欠か

せないものとなっている。

アルミナ担体に白金とレニウムをそれぞれ0.3 mass%程度担持した触媒は高オクタン価ガソリン製造用の石油改質に用いられる。触媒表面に炭素が一定量付着しても触媒能が劣化しないという性質を持ち，触媒を反応塔に装填後，3~4年は触媒活性を維持できる。現在，レニウムの年間需要の約10%がこの改質触媒に用いられている。

また，一般的に展延性が低く，加工が難しいとされるタングステンやモリブデンの単体あるいは合金にレニウムを添加すると，低温での延性と高温での強度およびクリープ特性が向上する(レニウム効果)。このため，レニウム添加合金は，超高温用の温度測定プローブや特殊耐震電球フィラメントなどに使用されている。

以上のように，航空機向け材料用途を中心に高温での耐久性を要求される様々な合金や触媒の添加元素としてレニウムは用いられている。レニウム資源の稀少かつ地域偏在性の高い性質から，代替材料の開発も進められているが，レニウム含有材料の高温性能は極めて高く，現時点ではレニウム含有材料に代わる材料は見つかっていない。このため，レニウムの需要は今後も増大すると予測されており，代替材料の開発と並行して，製錬・リサイクル技術開発を加速させ，稀少な資源であるレニウムの供給能力強化が望まれる。

## 文 献

- (1) 金属データブック改訂4版，日本金属学会，丸善，(2004)。
- (2) R. L. Rundnick and S. Gao: The Crust, Elsevier Ltd., (2004), 1-64.
- (3) F. Habashi: Discovery of rhenium and its consequences, Rhenium: Properties, Uses and Occurrence, Nova Science Publishers, NY, (2016)。
- (4) 八木良平，岡部徹：日本金属学会誌，**80**(2016)，341-349。
- (5) Roskill Information Services Ltd.: Markets Outlook to 2029, 11th Edition, (2019)。

次回！ 金属素描 No. 25 亜鉛

未来を先導する領域を開拓し、世界に発信する

金属×挑戦＝変革  
金属で未来を拓く・創る！

- S1: ハイエントロピー合金の材料科学(Ⅶ)**  
Materials Science and Technology in High-Entropy Alloys (VII)
- S2: 計算科学および新規腐食解析に基づく  
腐食現象の解析・可視化と  
機械学習による腐食予測**  
Analysis, Visualization and Prediction of Corrosion Phenomena via Computational Science,  
Machine Learning and Novel Characterization Techniques
- S3: 特異反応場における時間/  
空間応答を利用した新奇材料構造創成Ⅱ**  
Tailoring of novel structured materials using spatio-temporal responses  
under exotic reaction fields Ⅱ
- S4: 機能コアの材料科学Ⅲ**  
New Materials Science On Nanoscale Structures and Functions of Crystal Defect Cores, III
- S5: Additive Manufacturingの材料科学**  
Materials Science of Additive Manufacturing
- S6: 材料変形素過程のマルチスケール解析 (V)**  
Multi-scale analysis of elementary processes in plasticity (V)
- S7: ソフト磁性材料研究の新たな展開  
—組織設計・制御による次世代材料開発に向けて—**  
New developments of research on soft magnetic materials  
— Toward next generation material developments by structure design and control —
- S8: ワイドギャップ結晶の材料学と高温プロセッシングⅣ**  
Materials Science and high temperature processing of widegap materialsⅣ
- S9: ミルフィーユ構造の材料科学Ⅴ**  
Materials Science of Mille-feuille StructureⅤ

公募シンポジウム

- K1: 若手科学者へ贈る研究のヒントⅤ～未踏領域へ到達するために～**  
Gifts from pioneers to young scientists V ~: To hitch your wagon to star ~
- K2: 材料化学におけるイノベーションの役割と工業製品への展開Ⅲ**  
Innovations in materials chemistry and their effects on Industry III
- K3: 材料技術史から見るこれからの技術展開Ⅴ—鉄**  
Future growth expected from technological history of materials V - Iron and Steel
- K4: 医用材料・医療機器開発の最前線(Ⅲ)～光を用いる生体情報センシング～**  
Frontier in development of biomaterials and medical devices (III): Advanced Bioimaging Technologies
- K5: モビリティの未来を支える材料技術の最新動向  
(自動車技術会・日本鉄鋼協会・日本金属学会合同シンポジウム)**  
The latest trend of the materials R&D for the future Automotive

企画シンポジウム

演題登録  
締切

2022年 7/8(金) 17:00

事前参加  
申込締切

2022年 9/2(金)

2022年 秋期  
第171回  
講演大会

公益社団法人 The Japan Institute of Metals and Materials

# 日本金属学会

2022年

会期

9/20(火)～23(金)(祝)

会場

福岡工業大学 〒811-0295  
福岡県福岡市東区和白東3-30-1

参加方法の詳細はホームページで公開

状況によりオンラインに  
変更になる可能性もあります。



◇ 詳細は、本号会告(600頁)または本会ホームページをご覧ください。  
～ 皆様のご参加をお待ちしております。～

問合先

公益社団法人日本金属学会 講演大会係

TEL 022-223-3685 annualm@jimm.jp

https://jm.or.jp/

## 企画にあたって

井田駿太郎<sup>1</sup> 鈴木真由美<sup>2</sup> 高島克利<sup>3</sup> 寺本武司<sup>4</sup>  
長谷川 誠<sup>5</sup> 松本洋明<sup>6</sup> 眞山 剛<sup>7</sup>

現代社会が直面するエネルギー問題や持続性社会の実現に向け、構造材料の高強度化・軽量化は重要な課題である。これまでに固溶強化、析出(分散)強化、転位強化、結晶粒強化を利用して構造材料の高強度化、軽量化が図られてきたが、平成23~27年度(2011~2015)に実施された新学術領域研究「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学」で長周期積層(LPSO)構造を有する Mg 合金(LPSO 型 Mg 合金)における「微視的な硬質/軟質の層状構造のキンク強化」という新しい材料強化機構が見出された。さらに、平成30年度(2018)に発足した新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」においては LPSO 構造から発展した上位概念であるミルフィーユ構造における現象として、金属に高分子とセラミックスを加えた 3 大材料におけるキンクの形成と強化に関する組織的な研究が展開されている。そうした中で、LPSO 構造のように結晶構造スケールで硬質層と軟質層が積層する、いわゆる「結晶構造型ミルフィーユ構造」に加えて、共晶/共析合金のように複相組織スケールで硬質層と軟質層が積層する、いわゆる「組織制御型ミルフィーユ構造」においても顕著なキンク形成が観察されており、多様な組織の制御によるキンク強化の実現にも期待が寄せられている。一方で、キンクは材料種によらない変形局所化の様式であることから、一般的な現象として理解・表現する理論的アプローチの対象としても魅力的であり、ひずみ勾配塑性論や回転型の結晶欠陥である回位としての記述も試みられている。本特集では、多様なミルフィーユ構造を有する材料創製から実験・理論・数値解析に基づいたキンクの形成・強化メカニズムの解明に関する 7 件の解説をいただいた。

光原昌寿准教授(九州大学)らには「LPSO 型 Mg 合金のキンク形成観察とキンク導入加工プロセスの最適化」と題して、変形や加工に伴うキンク形成挙動に関する詳細な解析およびキンクを優先的、かつ、大量に組織中に導入するための塑性加工プロセスについて解説をいただいた。

江草大佑助教(東京大学)らには、「3 大材料におけるキンク変形帯の微視的構造」と題して、キンク現象に関して金属、セラミックス、高分子の材料の観点から代表的なキンク組織・構造における知見を解説いただき、液晶性ブロック共重合体におけるキンク組織および構造に関しては詳細に解説をいただいた。

眞山剛准教授(熊本大学)らには、「キンク形成とキンク強化の結晶塑性解析」と題して、結晶塑性解析手法により、塑性異方性の強い HCP 金属と塑性異方性は小さいが 2 相の強度が著しく異なるミルフィーユ構造体におけるキンク帯形成について解説いただいた。また、キンクの形態がキンク強化に及ぼす影響についても解説をいただいた。

稲邑朋也教授(東工大)らには、「幾何学的理論に基づくキンク変形のモデリングと解析」と題して、ミルフィーユ構造体に生じるキンク変形の形成機構とそれに伴う材料強化機構を対象とした連続体力学に基づく解析理論について解説をいただいた。

斎藤拓教授(東京農工大)には「ミルフィーユ構造を有する高密度ポリエチレン結晶の高強度化メカニズム」と題して、高密度ポリエチレン(HDPE)のミルフィーユ構造形成と熱延伸による高強度化について、高分子の結晶構造に関する概説と共に解説をいただいた。

<sup>1</sup> 東北大学工学研究科知能デバイス材料科学専攻; 助教

<sup>2</sup> 富山県立大学工学部機械システム工学科; 教授

<sup>3</sup> JFE スチール株式会社 スチール研究所 接合・強度研究部

<sup>4</sup> 神戸大学大学院工学研究科機械工学専攻; 助教

<sup>5</sup> 横浜国立大学大学院 工学研究院; 教授

<sup>6</sup> 香川大学創造工学部先端材料科学領域; 教授

<sup>7</sup> 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 丁目39-1)

Preface to Special Issue on "Various Kink Phenomena in Mille-Feuille Structure Materials"; Shuntaro Ida<sup>1</sup>, Mayumi Suzuki<sup>2</sup>, Katsutoshi Takashima<sup>3</sup>, Takeshi Teramoto<sup>4</sup>, Makoto Hasegawa<sup>5</sup>, Hiroaki Matsumoto<sup>6</sup> and Tsuyoshi Mayama<sup>7</sup>

Keywords: *kink, deformation, strengthening, MFS, LPSO, alloys, polymers, ceramics*

2022年 7 月26日受理[doi:10.2320/materia.61.541]



池田賢一准教授(北海道大学)には「MAX相セラミックス  $Ti_3SiC_2$  焼結体におけるキンク変形とキンク強化の可能性について」と題して、MAX相における  $M_{n+1}X_n$  層と A 層の結合の強さが異なる層が交互に積層されたミルフィーユ構造に由来するキンク強化の可能性について解説をいただいた。

江村聡氏(物質・材料研究機構)には「Ti 基合金におけるミルフィーユ構造の形成とキンク帯導入への展開」と題して、固溶強化能が大きな元素を含まない  $\beta$  系 Ti-Mo 系ならびに Ti-Cr 系合金に対し、冷間軽圧延と時効処理を組み合わせることで hcp 層と bcc 層から成る組織制御型ミルフィーユ構造の導入が可能であることや、この構造へのキンク導入に関する研究について解説をいただいた。

本特集では、ミルフィーユ構造を有する 3 大材料(金属、高分子、セラミックス)における多様なキンク現象について、材料創製からキンク形成・強化メカニズムの解明を目指した実験的・理論的・数値的アプローチによる研究を取り上げた。本特集が材料の力学特性を考える上で、新しい視点を「まてりあ」読者にもたらす一助となることを期待する。

最後に、ご多忙の中ご執筆いただきました先生方に対し、心より御礼申し上げます。



井田駿太郎



鈴木真由美



高島克利



寺本武司



長谷川誠



松本洋明



眞山 剛

# LPSO 型 Mg 合金のキンク形成観察と キンク導入加工プロセスの最適化

光原昌寿\* 山崎重人\*\* 安藤大輔\*\*\*

## 1. はじめに

昨今のエネルギー問題を背景に、インフラ設備、輸送機器等で使用される構造用金属部材の軽量化は喫緊の課題となっている。軽金属に分類されるマグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、チタン(Ti)等の高特性化(特に高強度化)は、この課題に対して直接的で工業的価値の高い解決策となり得る。実質的に構造用金属材料中で最軽量である Mg では、長周期積層(LPSO: Long Period Stacking Ordered)構造を有し全く新たな概念で強化された合金が我が国で発明<sup>(1)</sup>され、世界中から高い関心を集めている。LPSO 型 Mg 合金は、一般に、Mg-TM(遷移金属)-RE(希土類金属)系の合金組成を有し、LPSO 相と  $\alpha$ -Mg 相の複相で構成される<sup>(1)</sup>。その一方で、合金の性質を研究する上で、LPSO 相単相で構成される Mg 合金(例えば、Mg-9Y-6Zn 合金(数字はat.%, 以下でも同様に表現する)など)も広く利用されており、これも広義で LPSO 型 Mg 合金に含まれる。

Mg は HCP 構造をとり、原子最密面が 2 周期で積層した 2H 構造を有する。一方で、LPSO 相は、添加元素が偏析した層が周期的に積層欠陥として導入されることで、より長い周期構造を有する<sup>(2)</sup>。このように、濃度変調と積層構造が同期している構造を「シンクロ型 LPSO 構造」と呼び、これまでに 5 周期(10H)、6 周期(18R)、7 周期(14H)、8 周期(24R)の 4 種類が確認されている(H は六方晶、R は斜方晶)<sup>(2)</sup>。

LPSO 型 Mg 合金が従来の Mg 合金と大きく異なる点は、その塑性をもたらす変形モードにある。純 Mg または

一般的な Mg 合金では、塑性変形の際にすべりと双晶変形が活動する。LPSO 型 Mg 合金でもすべりは生じるが、双晶変形はその活動を著しく抑制される。そのような状況で、底面すべりをも活動させないような方向から力を加える(例えば、底面法線方向と垂直な方向から圧縮する)と、巨視的には座屈とも捉えられるような結晶面の屈曲が突如として出現する。ただし、この突発的な変形モードは座屈とは似て非なるものである。それは、この変形モードの発現が変形応力の低下と直接的には結びつかないことから明らかである。このような変形モードを「キンク」と呼び、古くは1942年にカドミウム単結晶の変形で発見され<sup>(3)</sup>、亜鉛単結晶などでも生じることが報告されている<sup>(4)</sup>。また、高分子材料や地殻・岩石の変形においても同様の変形モードが生じることが知られている<sup>(5)</sup>。しかし、多くの金属材料では転位すべりや双晶変形が容易であり、キンクを発生させるような変形の拘束条件が満たされる場合は稀である。そのため、ここ60年は忘れられた変形モードであったと言っても過言ではない。そのような変形モードが現代の最先端の合金において蘇ったことはノスタルジックではあるが、一方で、60年超の研究空白期間がゆえに、塑性変形による「キンク形成」と、導入されたキンクによって後続の変形が強く抑制される(つまり材料が強化される)「キンク強化」については、現在でも不明な点が多く残されている。

本稿では、はじめにキンク形成挙動を詳細に解析した研究例を紹介し、それに加えて、キンクを優先的に、かつ、大量に組織中に導入するための塑性加工プロセスを検討した内容について報告する。

\* 九州大学大学院総合理工学研究院; 准教授(〒816-8580 春日市春日公園 6-1)

\*\* 九州大学大学院工学研究院; 准教授

\*\*\* 東北大学大学院工学研究科; 准教授

Microstructural Observation and Wrought Processing Optimization for Kinking in LPSO Type Mg Alloy; Masatoshi Mitsuahara\*, Shigeto Yamasaki\*\*, and Daisuke Ando\*\*\*(\*Department of Advanced Materials Science and Engineering, Kyushu University, Kasuga. \*\*Department of Materials, Kyushu University, Fukuoka. \*\*\*Department of Materials Science, Tohoku University, Sendai)

Keywords: long period stacking ordered type Mg alloy, kink deformation, microstructure, electron microscopy, wrought processing, hardness  
2022年5月25日受理[doi:10.2320/materia.61.543]

## 2. LPSO 単相 Mg 合金におけるキンク形成挙動

ここでは、LPSO 単相合金である Mg-9Y-6Zn 合金一方向凝固材を用いた研究成果を示す。一方向凝固時の成長方向と平行に荷重軸を設定して、合金を圧縮すると、**図 1** に示すような激しい表面凹凸が発生する。この激しい表面凹凸は、細かなくさび状キンク (Ridge キンクと呼ばれる) が瞬時的・局部的・連鎖的に生じた結果である。

**図 2** に、SEM (Scanning Electron Microscope) 内その場圧縮試験中に実施した EBSD (Electron Backscattered Diffraction) 結晶方位解析結果を示す。すべての画像について、圧縮方向は紙面左右方向と一致している。その場圧縮試験を 4 回中断 (1st~4th と表記) し、それぞれの段階にて、(a) の SEM 二次電子像中に赤枠で示した領域の EBSD 測定を実施した。毎回の観察視野は、極めて精度良く一致させている。(b) の結晶方位分布図では、各測定点が観察方向へ向

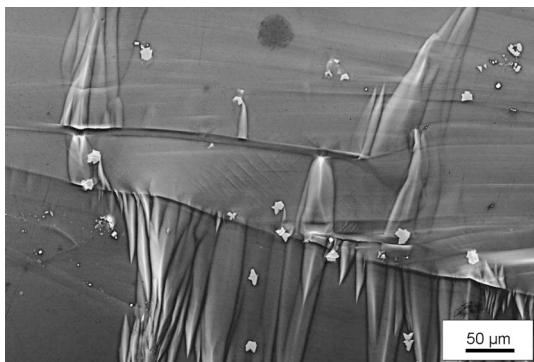


図 1 圧縮変形させた Mg-9Y-6Zn 合金に発生した Ridge キンクの SEM 二次電子像。

けている結晶方位を、図に併記する標準ステレオ三角形に合わせて色付けている。(c) の GROD (Grain Reference Orientation Deviation) マップと (d) の KAM (Kernel Average Misorientation) マップは、いずれも結晶方位変化に基づいてひずみを表現するものである。GROD は結晶粒の平均方位からの各測定点の方位変化を、KAM は隣接する測定点間の方位差の平均値をそれぞれ表している。図 2 より、初期 (変形前) では各結晶粒内の結晶方位は均一であることがわかる。圧縮変形が開始すると、1st の段階ですでに、視野の一部において局所的な結晶方位変化が捉えられている。2nd から 4th へと変形が進むに連れて、結晶方位回転の角度が増加し、その領域も拡大している。GROD マップより、結晶方位変化が生じた領域はくさび状の形態に発達していくことがわかる。また、結晶方位変化が生じていない部分とくさび状の方位変化領域は、高い KAM 値で色付けられる境界で区切られており、さらに、くさび状領域の中にも、同様の境界が存在している。ここで (a) の SEM 二次電子像に着目すると、3rd の段階までは EBSD 測定視野内に目立った変化は観察されていないことがわかる。4th の段階において初めて表面起伏が生じ、組織内部にキンクが形成されたと認識される。そのキンク形成領域は、EBSD 測定において早期に結晶方位変化が生じていたそれと完全に合致する。したがって、1st から 3rd の間で観察された結晶方位回転は、表面起伏としてキンクが発現する前駆段階であると捉えることができる。我々はこの前駆段階をプレキンクと名付けている<sup>(6)</sup>。

次に、このプレキンクの発達挙動に着目する。**図 3** は、**図 2** の GROD マップ中に記した白線 A、B 上における結晶方位回転角の変化 (方位差角) を表したラインプロファイルである。このプロファイルは白線の左側を起点としており、(a) の Point to origin では起点と白線上の各測定点の方位差角

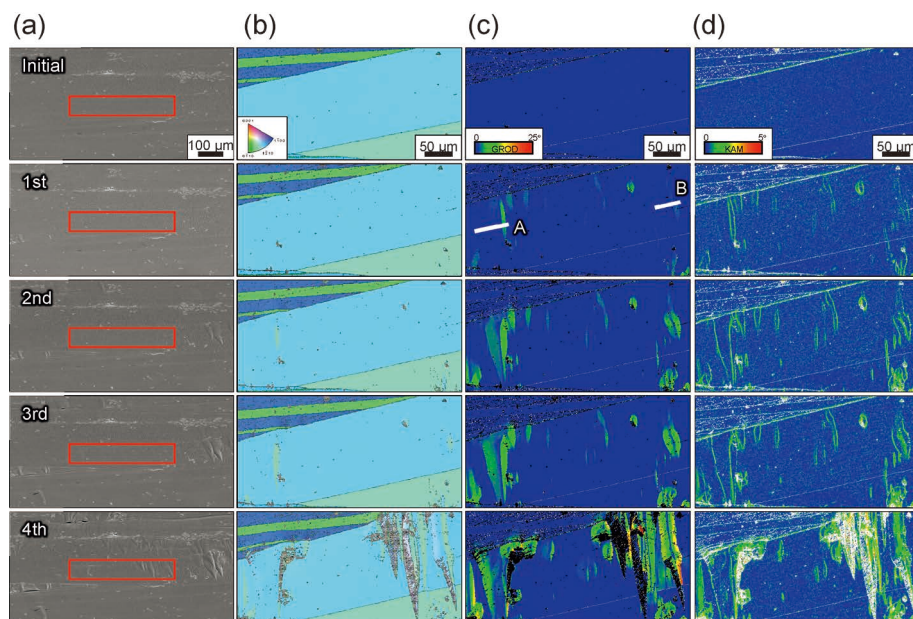


図 2 SEM 内その場圧縮試験により観察した Mg-9Y-6Zn 合金のキンク形成挙動；(a) 70度傾斜して撮影した SEM 二次電子像，(b) 結晶方位分布図，(c) GROD マップ，(d) KAM マップ。



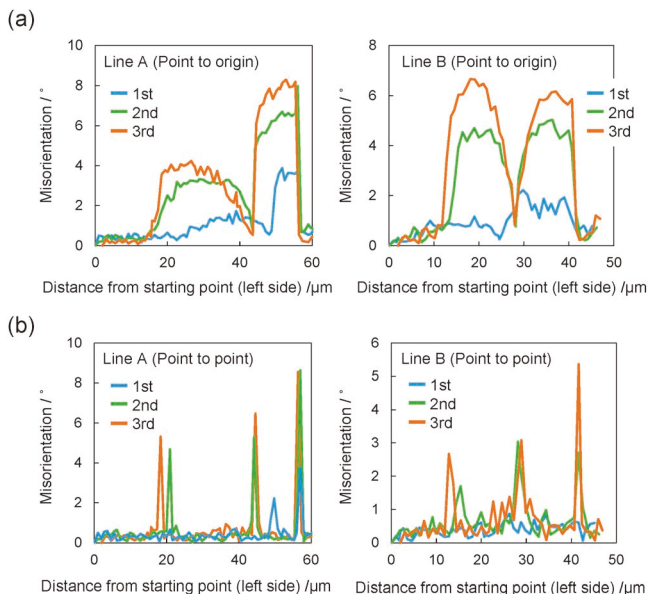


図3 キング発生領域における結晶方位回転角の線分析結果；(a)Point to origin, (b)Point to point.

を、(b)の Point to point では隣接測定点間の方位差角を示している。変形が進行した 3rd の段階の Point to origin のプロファイルを見ると、A と B のいずれも 2 つの方位差角のピークを持つ M 形状であることがわかる。また、1st から 3rd へと変形が進むにつれて両ピークの方位差角は増加している。このような傾向は、図 3 において評価した 2 つのキング以外でも同様であった。次に、Point to point の方位差角プロファイルに着目する。このプロファイルにおけるピークは、上述した高 KAM 値境界に対応する。各 Point to point プロファイル中で最も右側に位置するピークに着目すると、変形の進行に伴って方位差角が増加しているが、位置の変化はほとんどない。一方で、中央のピークや左のピークは、方位差角が増加しつつ、位置が左側へと移動している。このように、表面起伏としてのキングの前駆段階と考えられるくさび状の方位変化領域は左右の 2 領域に分けられ、その発達挙動には順序や方向性が存在することがわかる。

続いて、キングの 3 次元形態について観察した例を紹介する。図 4 は、圧縮した Mg-9Y-6Zn 合金一方向凝固材に発生した Ridge キングの SEM 二次電子像と GROD マップである。視野内には (I)~(III) と記号をつけた 3 つのキングが観察される。(I) と (II) のキングは Ridge キングに分類される形態を持ち、特に (I) のキングでは底面の屈曲が急峻である。(II) のキングでは、像上部と下部にのみ明瞭な屈曲が認められ、像中央部では底面の曲がり方が緩やかである。このような急峻もしくは緩やかな結晶方位回転は GROD マップの色の変化により明確に捉えることができる。(III) のキングは表面凹凸が小さく SEM 像では存在を認識しにくいですが、GROD マップではくさび型の結晶方位変化領域として判別できる。この特徴から、(III) のキングはプレキングに分類できる。次に、図 5 に、(II) と (III) のキングについて、機械研磨の繰り返しによるシリアルセクション観察を行った結

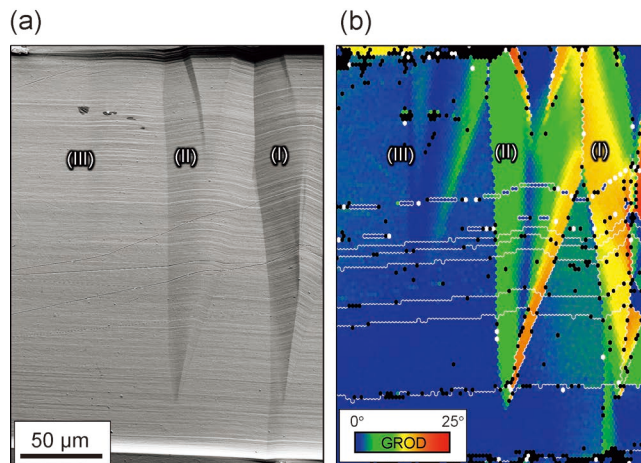


図 4 圧縮した Mg-9Y-6Zn 合金に発生した Ridge キングの (a)SEM 二次電子像と (b)GROD マップ。

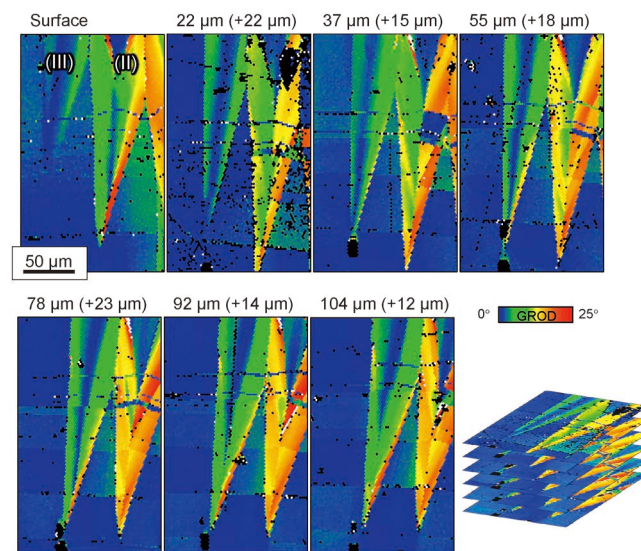


図 5 シリアルセクションによるキングの 3 次元形態観察結果。

果を示す。図 5 では、左上に試料の初期表面での GROD マップを示しており、6 度スライスを繰り返した観察結果を順に並べて示している。各図に付記する数値は初期表面からの距離であり、括弧内の数値は一つ前のスライスからの変化量である。本実験では手動の機械研磨によってスライスを行ったため、その間隔を一定にすることは困難であるが、1 スライス当たり平均 17 μm である。初期表面では、先に述べた (II) の Ridge キングと (III) のプレキングが認められる。22 μm のスライス像では (II) のキングの中央部に急峻な底面屈曲が認められるようになり、その形態が図 4 の (I) のキングに類似する。また、(III) のプレキングにおいては、その領域が拡大していることがわかる。37 μm のスライス像では、(III) のプレキングの領域がさらに拡大し、くさび型の先端が認められるようになるが、キング内部での底面の湾曲は緩やかなままである。さらにスライスを進めると、(II) と (III) のキングはともに結晶方位変化が増大していくが、その

一方で、領域の拡大はほとんど生じなくなる。特に、どちらのキンクでも、くさびの先端の位置が前方の大角粒界に接する状態で保持され、それ以上の成長を起こしていないことは興味深い。また、(Ⅲ)のキンクは、92  $\mu\text{m}$ のスライス像以降においては、(Ⅰ)や(Ⅱ)のキンクとほぼ同様の形態を示すようになる。これらの観察結果は、プレキンクが、成熟したRidge キンクの成長フロントに形成される組織であることを示唆しており、プレキンクがRidge キンクの前駆段階であろうと考えた図2のSEM その場観察の結果と良く整合する。キンクのさらに詳細な3次元形態については、既報の論文<sup>(7)</sup>を参考いただきたい。

### 3. $\alpha$ -Mg 相と LPSO 相から成る複相 Mg 合金におけるキンク形成

ここでは、 $\alpha$ -Mg 相と LPSO 相から成る複相 Mg 合金に

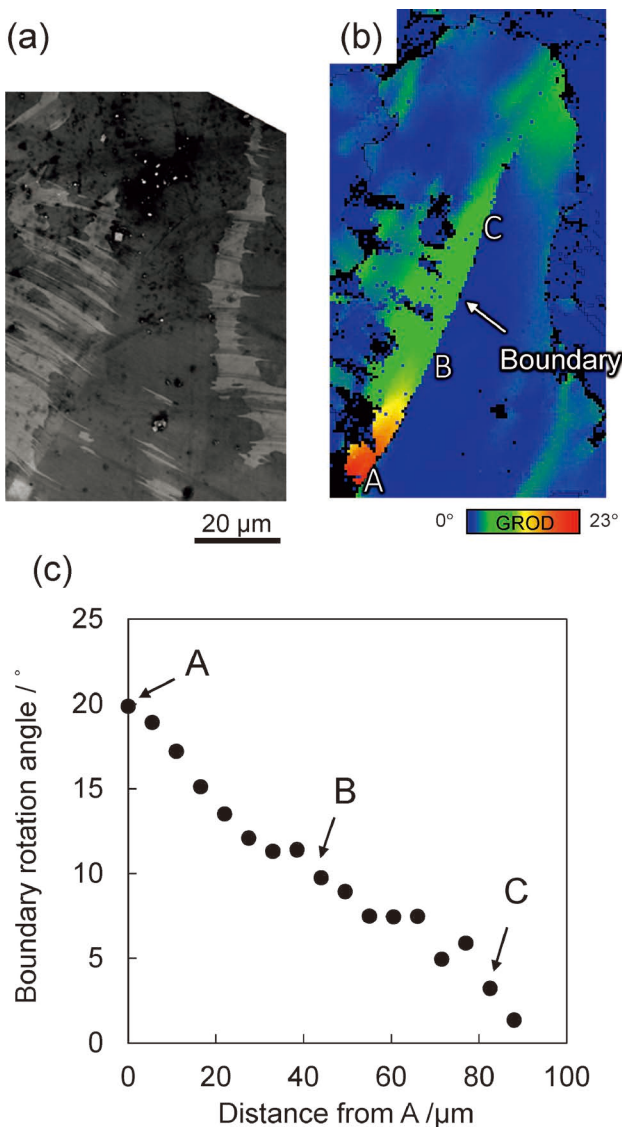


図6 圧縮変形を加えた Mg-2Y-1Zn 合金の(a)SEM 二次電子像、(b)GROD マップおよび(c)変形により導入された境界での結晶方位回転角の変化。

おけるキンク形成について述べる。前章にて、LPSO 相に形成するキンクについて触れた。本章では、 $\alpha$ -Mg 相に形成されるキンクに着目する。これまでに純 Mg においてキンクの発生が報告された例はなく、本来、 $\alpha$ -Mg 相においてキンクという変形モードは活動しない。しかし、 $\alpha$ -Mg 相と LPSO 相から成る複相 Mg 合金では、 $\alpha$ -Mg 相においてもキンクが形成する。

図6に、圧縮変形を加えた複相合金(Mg-2Y-1Zn 铸造まま材)に発生した表面起伏部の観察結果を示す。(a)のSEM 二次電子像において濃灰色で示される部分が母相である  $\alpha$ -Mg 相、淡灰色で示される部分が LPSO 相である。(b)中に示すように、圧縮変形により  $\alpha$ -Mg 相中に境界が形成され、結晶方位変化が生じている。興味深いことに、この境界は明らかに  $\alpha$ -Mg 相内で途絶えている。(c)には、この境界での結晶方位回転角を10  $\mu\text{m}$  ごとに測定した結果を示す。ここで図中のA、B およびCは、(b)中に記した位置に対応する。(c)より、この境界での回転角が、A 点からC点に向かうに伴って徐々に小さくなることがわかる。以上のような特徴は一般的な結晶粒界や双晶境界とは明らかに異なっており、これまでに報告されているキンク境界の特徴と類似している。

図7は、図6で示した境界のSTEM(Scanning Transmission Electron Microscope)明視野観察結果である。(a)は境界中央部であり、図6のB点の位置に対応する。この図より、底面に沿うすべり線が境界で屈曲していることが確認でき、この境界がキンク境界であることがわかる。また、底面の回転角はEBSDの解析結果とおおよそ一致していた。(b)は境界先端部であり、図6のC点の領域である。境界近傍に強いコントラストを与える等傾角干渉縞によって、境界が結晶粒内で途切れている様子が確認できる。また、(c)と

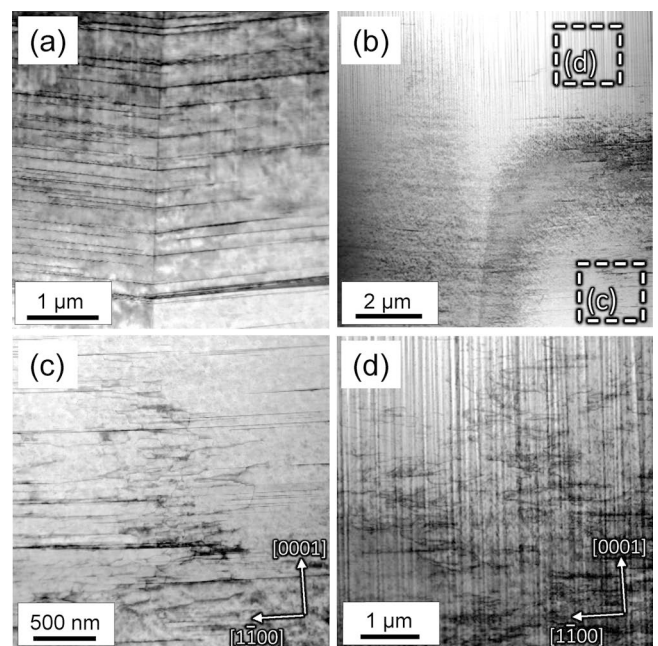


図7  $\alpha$ -Mg 相に形成したキンク境界のSTEM 明視野観察結果。



(d)は、(b)中にそれぞれ記載した領域を二波励起条件下で撮影したものである。これらの図から、境界先端部において、 $\alpha$ -Mg相の室温変形ではほとんど生じることのない非底面すべりが活動していることがわかる。このことは、境界の先端部において非常に大きな弾性応力場が生じていることを示唆している。

以上のように、LPSO型Mg合金では、本来、キンク変形を生じないはずの $\alpha$ -Mg相にもキンクが導入される。このことが、LPSO型Mg合金に発現する優れた力学的性質に繋がると考えられる。

#### 4. 加工プロセスによるキンク導入量の違いとその強化量

LPSO相を含有するMg合金では再結晶を積極的に生じさせない温間押出加工を施すことで、晶出相のLPSO相や $\alpha$ -Mg母相自体にキンクの導入が可能であり、そのキンクが転位すべりの障害となることで機械強度が向上することが広く知られるようになった。特に、LPSO相分率が86%程度であるMg-7Y-4Zn合金において casting材の引張強度は150MPaであるが、温間押出加工により470MPaまで上昇することが報告されている<sup>(8)</sup>。ここで、この著しい強化量には温間押出加工で形成された集合組織による強化だけでは説明できない強化が約20-30%存在し、これがキンク導入による効果、つまりキンク強化であろうと推察されている<sup>(9)</sup>。また、一方向凝固により得られたLPSO単相合金(Mg-9Y-6Zn)において、結晶構造のc軸方向に垂直に圧縮応力/ひずみを与えることで容易にキンク変形帯を導入でき、その加工材を元のc軸から45度回転して切り出すことで、容易に底面すべり変形できる試料を作製して、再度圧縮変形することで、導入したキンクにより底面すべりが抑制されて高強度化することも確かめられている<sup>(10)</sup>。さらに、キンク量と強化量との関係性について調べた結果では、単位面積当たりの折れ曲がり回数が多いほど<sup>(11)(12)</sup>、キンク変形による結晶回転角度が大きいほど材料強化に有効であること<sup>(13)</sup>も示された。ここで、キンク変形による結晶回転には大きな回転角度を有するくさび型Ridgeキンクや、小さな回転角度でキンクが密に並んで形成され扇型に組織回転させるOrthoキンクが報告されており、これらキンク導入がどうして材料強化に寄与するのかについては、新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」において回位や幾何学的理論での解釈が試みられている。その詳細な解説は後述の特集記事をご参照いただきたい。本稿では、キンク変形帯を高密度・高体積分率導入することでLPSO型Mg合金が高強度化するという前提に立ち、最も多く研究されている温間押出加工と、様々な塑性加工方法で得られた材料の強化量を同一方法で測定・比較して最適な塑性加工法の提案を試みた研究を紹介する。

サンプルには、LPSO相がほぼ100%(その他金属間化合物相を微量に含有する)であるMg-9Y-6Zn casting材を用いた。これは、 $\alpha$ -Mg相を含むことで問題が複雑化することを

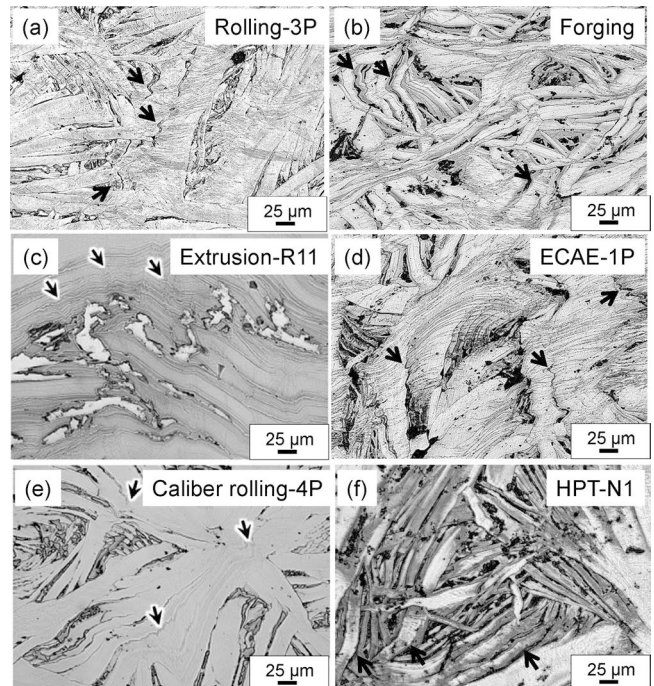


図8 様々な塑性加工方法で得られた組織形態；(a)圧延，(b)鍛造，(c)押出，(d)ECAE，(e)溝ロール圧延，(f)HPT。

避ける狙いがある。塑性加工法には、鍛造、圧延、押出、ねじりという単純な塑性加工法に加えて、溝ロール圧延、Equal-Channel-Angular Extrusion (ECAE)、高圧ねじり加工(HPT: High Pressure Torsion)と強加工方法も選択した。また、可能な限り塑性加工温度を350°Cに統一している。強化量の指標にはビッカース硬さ試験(300 gf, 10 s 保持)を用いた。ここで、鍛造で得られたランダム方位の多結晶体LPSO単相材の硬さはおよそ80 Hvであった。

図8に、各塑性加工プロセスで得られた典型的な金属組織写真を示す。いずれの塑性加工方法でも、加工中に複数のキンクが形成されていることがわかる。それらは、特定の結晶粒の内部に高密度に存在していることが多い。また、このスケールでの組織観察では、キンク形態は主にRidgeタイプであるが、緩やかにLPSO相が湾曲している箇所も散見され、TEMレベルではOrthoタイプも観察されることが示唆された。図9に、各塑性加工プロセスで得られた材料のビッカース硬さを塑性加工で与えた相当ひずみ量で整理したグラフを示す。このグラフには既報<sup>(14)</sup>の内容に新たに単純ねじり変形、渦状押出の結果を加えたものである。ビッカース硬さは相当ひずみ量と強い正の相関があることが見受けられる。一方で、各塑性加工プロセスにおいて同一の相当ひずみ量に着目すると、単純圧縮である鍛造に比べて、溝ロール圧延やHPTのような材料拘束があり、多方向から複雑な変形が加わるような加工方法の方がビッカース硬さの増分が大きいことが示唆される。その理由は初期材にランダム配向の casting材を用いているので、鍛造などの単純な加工方法ではその変形方向と初期結晶方位においてキンクを形成しやすい粒のみキンクが形成されるが、多方向から複雑な変形が加わる



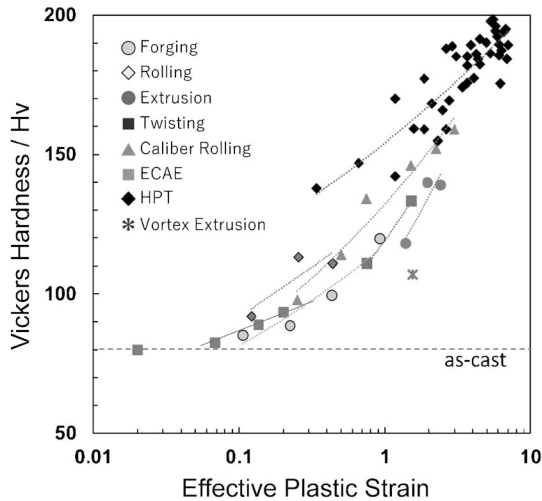


図9 様々な塑性加工方法で得られた材料の Vickers 硬さと相当塑性ひずみの関係.

場合には多くの粒で、かつ二次的、三次的なキンクの導入が可能になるからだと考えている。また、溝ロール圧延ではその材料の上下方向と挿入方向を変えることで、材料に一定方向の大きなせん断を加える「リバース圧延」を施すことが可能であり、通常の方法と相当ひずみ量は同じであっても、せん断変形が大きな試料ではキンクの形成割合が大きく、強化量も大きくなること<sup>(15)</sup>が報告されている。このように強化量をせん断ひずみ量で整理できる可能性が示唆され、現在、各塑性加工プロセスの FEM 解析を行って強化量を比較する研究を新学術領域研究の活動の中で行っている。

しかし、たとえ多方向から複雑な変形が加わる強加工法で超高強度材が創製できたとしても、その加工可能なサイズはごく小さく、構造用部材として用いるのは困難である。そこで、押出加工においてダイス形状を工夫することで、ねじり変形を導入する強加工法である渦状押出に注目した研究を行っている。図10で示すように、渦状押出では通常押出に比べて、Ortho タイプのキンクの割合が多く、明確な Ridge タイプのキンクは稀であった。ここで、450°Cで R4 の押出比で加工した通常押出ではビッカース硬さが117 Hvであった一方で、同一形状のダイスに材料回転に寄与する溝を加えた渦状押出においては107 Hv とその強化量は相当塑性ひずみ量が大きいのにも関わらず小さかった。このような特徴は、単位面積当たりの折れ曲がり回数が多いほど<sup>(11)(12)</sup>、または、キンク変形による結晶回転角度が大きいくほど<sup>(13)</sup>材料強化に有効であるとする報告と一致する。その一方で、圧縮変形能を比較すると、渦状押出材の方が約3倍圧縮(破断ひずみ30%強)できることがわかった。このような力学特性の変化は、渦状加工によって導入されたキンクの種類が、Ortho タイプに優勢であることに起因していると推察される。すなわち、強化量が小さい理由は Ridge タイプのキンクが少ないためであり、Ortho タイプのキンクはキンク強化能自体が小さい一方で、加工硬化率を増加させ、均一変形を助長する効果に優れることが示唆された。今後はこの結果も踏まえて、

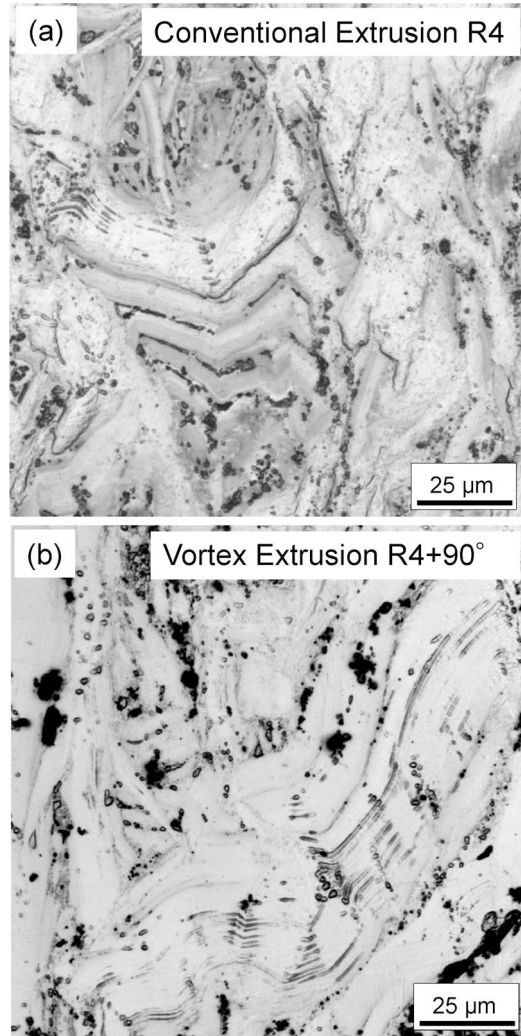


図10 (a)押出比 R4 の通常押出, (b)90度のねじり変形を加えた押出比 R4 の渦状押出により得られた組織形態.

マグネシウム合金の既存の強度-延性バランスを凌駕するような材料にすべく研究を続けていきたいと考えている。

## 5. ま と め

本稿では LPSO 型 Mg 合金におけるキンクの組織的特徴およびその形成、さらにはキンクをより効果的に導入するための塑性加工方法の探索について紹介した。本新学術領域研究を通して、新たな Mg 合金(例えば、Mg-Mg<sub>2</sub>Ca 共晶合金など)や他の金属系(例えば Ti 合金, Fe-C 合金, Al 基共晶合金など)、さらにはセラミックスや高分子といった金属とは結合性が全く異なる材料においても、キンクの発現が報告され始めている。今後は、キンクが材料強化に寄与するメカニズムを明らかにすることで、従来の固溶強化、析出強化、加工強化、結晶粒微細化強化、複合強化に次ぐ第6番目の新しい材料強化法として広く認知されることを目指し、キンク強化理論構築のための研究を推進していく予定である。キンクを発現させるために必要不可欠な微細組織とその変形条

件およびキック導入のための塑性加工方法が確立されることで、日本発の斬新な材料創成が一層加速されることを期待してやまない。

本研究は科学研究費補助金(新学術領域研究 18H05475, 18H05477, 18H05481, 19H05116 および 21H00088)の補助を受けて遂行されました。また、本研究の遂行にあたり、物質・材料研究機構 染川英俊博士、豊橋技術科学大学 戸高義一教授、足立望助教、同志社大学 湯浅元仁准教授、九州大学 博士課程の徳澄翼氏、同大学 修士課程の福島碧氏の協力を得ました。また、SEM 内その場圧縮試験は九州大学 西田稔名誉教授、赤嶺大志助教のご協力のもと実施されました。この場をお借りして感謝いたします。

## 文 献

- (1) 河村能人：まてりあ, **54**(2015), 44-49.
- (2) 阿部英司：まてりあ, **54**(2015), 50-54.
- (3) E. Orowan: Nature, **149**(1942), 643-644.
- (4) J. B. Hess and C. S. Barrett: J. Miner., Met. & Mater. Soc., **185**(1949), 599-606.
- (5) A. S. Argon: Philos. Mag., **28**(1973), 839-865.
- (6) S. Yamasaki, T. Tokuzumi, W. Li, M. Mitsuhara, K. Hagihara, T. Fujii and H. Nakashima: Acta Mater., **95**(2020), 25-34.
- (7) T. Tokuzumi, S. Yamasaki, W. Li, M. Mitsuhara and H. Nakashima: Materialia, **12**(2020), 100716.
- (8) K. Hagihara, A. Kinoshita, Y. Sugino, M. Yamasaki, Y. Kawamura, H.Y. Yasuda and Y. Umakoshi: Intermetallic, **18**(2010), 1079-1085.
- (9) K. Hagihara, Z. Li, M. Yamasaki, Y. Kawamura and T. Nakano: Acta Mater., **163**(2019), 226-239.
- (10) K. Hagihara, M. Yamasaki, Y. Kawamura and T. Nakano: Mater. Sci. Eng. A, **763**(2019), 138163.
- (11) H. Somekawa, D. Ando, K. Hagihara, M. Yamasaki and Y. Kawamura: Mater. Charact., **179**(2021), 111348.
- (12) Y. Nakasuji, H. Somekawa, M. Yuasa, H. Miyamoto, M. Yamasaki and Y. Kawamura: Mater. Lett., **292**(2021), 129625.
- (13) H. Somekawa and D. Ando: Mater. Sci. Eng. A, **780**(2020), 139144.
- (14) H. Somekawa, Y. Todaka, D. Ando and M. Yuasa: Mater. Lett., **304**(2021), 130653.
- (15) H. Somekawa, M. Yamasaki, Y. Kawamura and T. Inoue: Mater. Charact., **175**(2021), 111080.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

光原昌寿  
 2008年3月 九州大学大学院総合理工学府 博士課程修了  
 2008年4月-2010年3月 九州大学大学院総合理工学研究院 特任助教  
 2010年4月-2016年2月 九州大学大学院総合理工学研究院 助教  
 2016年3月- 現職  
 専門分野：高温材料学，金属組織学，材料強度学  
 ◎主に高温材料の変形・強度・破壊に関わる材料組織を対象とした研究に従事。

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



光原昌寿



山崎重人



安藤大輔

# 3 大材料におけるキンク変形帯の微視的構造

江草大佑<sup>\*</sup> 戸木田雅利<sup>\*\*</sup> 阿部英司<sup>\*,\*\*\*</sup>

## 1. はじめに

一般に構造材料設計においては、多結晶材料の連続かつ安定な塑性変形のため「結晶構造には独立な5つのすべり系が必要」とするフォン・ミーゼス条件が金科玉条となる。新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」<sup>(1)</sup>では、あえて容易すべり系が限定される「微視的な硬質層・軟質層による層状構造」を創製し、キンク変形を効果的に誘発することで、従来にない新しい概念での材料高強度化を目指している。

キンク変形は、六方晶系(hcp)金属である亜鉛やカドミウム単結晶の容易すべり面(稠密面)に対して平行に圧縮応力を与え、転位運動を抑制した際に発現する変形形態として1942年 Orowan により報告された<sup>(2)</sup>。巨視的には座屈の様相を呈し、微視的には双晶に類似の結晶回転を生じている。これらの特徴は、強度劣化の原因とされることはあっても、材料強化に寄与し得るとは考え難い。その発見から半世紀以上を経て、キンク変形が注目されるきっかけとなったのは、長周期積層規則(LPSO)型 Mg 合金のキンク変形帯導入による顕著な高強度化である<sup>(3)(4)</sup>。hcp-Mg の積層多形を基本格子とする LPSO 構造は結晶異方性が大きく、その多結晶材の高温押出加工中に容易にキンク変形が進行する。キンク変形帯を高密度に導入することによって初めて強度発現する「キンク強化現象」は、全く予想外の発見であった。その後の研究により、キンク変形を誘発するために LPSO 構造が必須ではないことも明らかとなっている。例えば、元素添加量を抑えた希薄 LPSO 型 Mg 合金系では、LPSO 構造ユニ

ットである元素濃化積層欠陥(SESF)が hcp-Mg マトリクス中に無秩序かつ疎に配列する組織が生成し、それらもキンク変形を通して高強度が発現する。この事実から、LPSO 構造を内包する「硬質層・軟質層よりなるミルフィーユ構造群(MFS)」を上位概念として、現在の展開へとつながった。

キンクが材料強化に有効である、との視点に立つと、Mg 合金以外にも鉄鋼材料、Ti 合金や Al 合金にも類似の変形帯がしばしば見受けられる事に気づく。さらに、キンク変形・キンク形態はセラミックス<sup>(5)</sup>、高分子材料<sup>(6)</sup>、炭素繊維<sup>(7)</sup>、液晶<sup>(8)</sup>といった多様な物質・材料においても報告されている。これら様々な材料におけるキンク強化発現の可能性については、現在研究が進行中である。本稿では、三大材料である金属・セラミックス・高分子の例として、それぞれ Mg 合金・MAX セラミックス相・液晶性ブロック共重合体に形成されたキンク変形組織の微視的構造の特徴について紹介する。

## 2. キンク変形における課題

双晶と同様の格子回転型の変形であるにもかかわらず、なぜキンクがマイクロな破壊起点を与えず、材料強化に有効となり得るのであろうか。その解明へ向けて、キンクの微視的構造の解析を進めている。ここでは、キンク変形の本質的課題と、既存のモデルについて簡単に触れておきたい。

hcp 金属のキンク変形で生成した急峻な界面(キンク界面)の形成機構として、結晶内に逆向きの符号を有する転位対(dipole)の生成・再配列によりキンク界面の形成を説明する

\* 東京大学大学院工学系研究科；1)助教 2)教授(〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)

\*\* 東京工業大学物質理工学院；教授

\*\*\* 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点；チームリーダー

Kink Microstructure in Alloys, Ceramics, and Polymers; Daisuke Egusa\*, Masatoshi Tokita\*\* and Eiji Abe\*\*\*(\*Graduate School of Engineering, University of Tokyo, Tokyo. \*\*School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology, Tokyo. \*\*\*Research Center for Structural Materials, National Institute for Materials Science, Tsukuba)

Keywords: kink, mille-feuille structure, magnesium alloys, MAX phase, block copolymers, lamellae, electron microscopy, small-angle x-ray scattering

2022年6月23日受理[doi:10.2320/materia.61.550]



Hess-Barrett モデル<sup>(9)</sup>が知られている。このモデルでは、典型的にはポリゴニゼーション等による乱れを多数含む界面となることが予測される。この予測特徴は、Mg 合金中に観察される原子レベルで平滑なキンク界面構造とは一致しない。一方、双晶は一般に急峻な界面を生成する。例えば hcp 構造における双晶変形では、幾何学的には双晶界面の取り得る構造は無数に考えられるが、実際にはせん断量およびシャフリング量が少ない構造が優先的に選択され、母相と双晶領域は特定の格子対応のみが許されることになる。これは、キンク変形が連続的な結晶回転変形を許容する特徴とは相容れない。キンク界面は、転位変形・双晶変形の一見相反する特徴を同時に有しており、これを矛盾無く説明する変形機構は明らかとなっていない。

我々は、キンク変形の微視的理解のためには回位 (disclination) が鍵であると考えている。回位は、転位と同様に連続体の変形を表現する線状欠陥の一つであり、古くから Volterra の円筒モデルにより示されている<sup>(10)</sup>。転位がせん断変形に対応する一方、回位は回転変形に対応する変形素子となりうる。回位を用いれば、結晶回転をベースとするキンク変形領域の表現自体は見通しがよくなるであろう。しかしながら、回位導入に伴う体積変化は(転位のそれと比較して)一般に非常に大きく、変形領域のサイズに依存した大きな弾性エネルギーを生じてしまう<sup>(11)</sup>。実際、結晶性材料における回位の存在は微粒子<sup>(12)</sup>、強加工材料<sup>(13)</sup>、二次元材料<sup>(14)</sup>など、回位形成に伴うエネルギーの増大を自由表面や界面等で緩和しうる系での報告に留まっている。バルク体でのキンク界面近傍における回位の有無、およびそのキンク変形中のダイナミクスが明らかとなれば、上述の転位変形、双晶変形とも異なる、新しい回位変形のモデル構築が期待される。

### 3. 金属材料：Mg 合金におけるキンク組織・構造

本節ではミルフィーユ構造を有する Mg 合金の事例として、LPSO 型 Mg 合金、および近年進展が著しい MFS 型 Mg 合金での解析結果を紹介する。図 1 に LPSO 型・MFS 型 Mg 合金より取得した高角環状暗視野 (HAADF)-走査透過型電子顕微鏡 (STEM) 像を示す。LPSO 相は hcp 構造の 2H 積層 (ABAB...) に対して、Intrinsic II 型に相当する積層欠陥 (ABCA) を周期的に導入した積層秩序を持つ。また、STEM 像のコントラストから確認できるように、積層欠陥部に添加元素が選択的に濃化した化学秩序を有しており、積層秩序と化学秩序が同期したシンクロ型 LPSO 構造と名付けられている<sup>(15)</sup>。一方で、MFS 型 Mg 合金では、LPSO 型合金に含まれる添加元素濃化積層欠陥 (SESF) が積層方向にランダムに分布した構造として理解されている<sup>(16)</sup>。いずれの Mg 合金においても、軟質層に相当する Mg 層に対して、硬質層として振る舞う SESF が導入された積層構造を有しており、その構造異方性に起因してキンク変形が発現すると考えられている。

高温押出加工によりキンク組織を導入した LPSO 型・

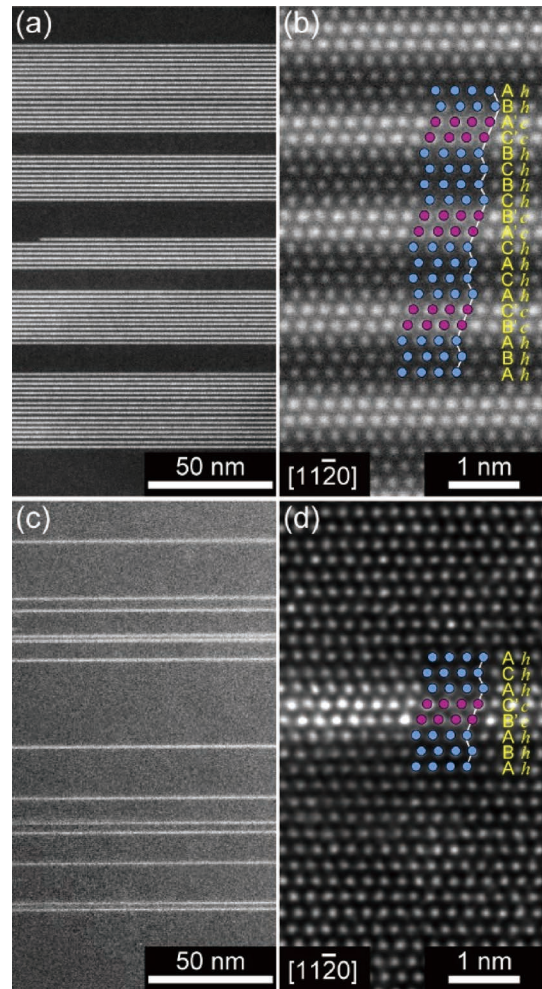


図 1 (a), (b) LPSO 型 Mg 合金および (c), (d) MFS 型 Mg 合金より取得した HAADF-STEM 像。各合金組成は以下の通り、LPSO 型：Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Y<sub>2</sub> (at%)、MFS 型：Mg<sub>97</sub>Zn<sub>1</sub>Gd<sub>2</sub> (at%)。(オンラインカラー)

MFS 型 Mg 合金に対して透過型電子顕微鏡 (TEM) 観察により変形組織を解析した<sup>(17)</sup>。図 2(a) に示す TEM 像より、LPSO 型 Mg 合金は LPSO 相および  $\alpha$ -Mg 相の 2 相から構成されており、点線で示す LPSO 相の形態から結晶の折れ曲がり、すなわちキンク界面が導入されていることが確認できる。界面近傍より取得した電子回折図形より、キンク界面での回転角度は数度~数十度までの多様な値を取っており、いわゆる双晶界面などとは異なる特徴を示している。キンク界面近傍の領域において、hcp 構造の底面方向に対応する二波励起条件で取得した TEM 像 (図 2(b)) を見ると、底面方向の成分を有する転位 ( $a$  転位,  $b=1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ) がキンク界面に沿って配列している。この転位は H-B モデルで示されている結晶回転を埋め合わせるために導入された幾何学的に必要な転位 (GN 転位) に相当すると考えられる。

続いて、MFS 型 Mg 合金の場合については、図 2(c) に示す TEM 像より、ほぼ  $\alpha$ -Mg 相のみから組織が構成されており、局所的に SESF に相当する底面方向に伸長した線状のコントラストが確認できる。SESF の方位変化から、矢頭



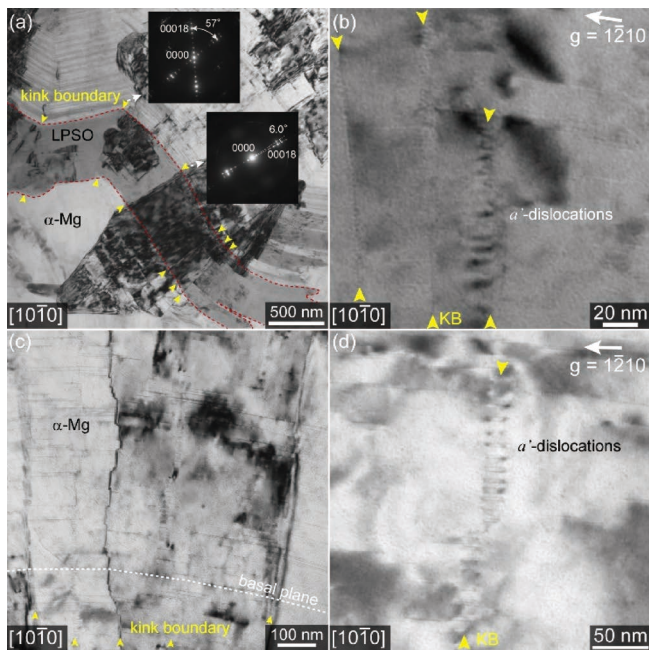


図2 (a), (b)LPSO型Mg合金および(c), (d)MFS型Mg合金 押出材より取得したTEM明視野像. 押出条件は以下の通り, 押出温度: 350°C, 押出比: 10, ラム速度: 2.5 mm/s. (b)は文献<sup>(17)</sup>から許諾を得て一部改変して転載. (オンラインカラー)

で示す部分で数度程度の結晶回転が起きており, キング界面が導入されていることが確認できる. LPSO型Mg合金と同様に二波励起条件で取得したTEM像(図2(d))より, キング界面に沿ってa転位が配列している様子が観察される. 興味深いことに, 上記の転位に由来するコントラストは底面方向にやや分裂しているとともに, その間の領域ではSESFに類似した線状のコントラストが確認できる.

キング界面近傍に存在する欠陥構造の詳細について, HAADF-STEM観察により解析した. LPSO型Mg合金の場合, 図3(a)に示されるようにキング界面に沿ってSTEM像強度が低下した領域が配列している. 当該領域を拡大したSTEM像(図3(b))より, 像強度が低下した領域はLPSO構造中のSESF上に存在することが分かる. 図中に示すバーガス回路から, この領域に原子余剰面が導入されていること, すなわちTEM観察で確認されたa転位がSESF上に存在していることが確認できる. 加えて, 転位部分では積層が局部的にfccからhcpに変化しており, 積層変化に起因して添加元素濃度が低下したと考えられる. 上記結果から, キング界面上に存在する転位は図3(c)の模式図で示すように, SESF上でShockley部分転位に拡張したa転位であり, 拡張に伴う積層変化(fcc→hcp)によってナノスケールのhcp-Mg領域を導入した構造に相当している.

一方で, MFS型Mg合金の場合には図3(d)に見られるように, キング界面に沿ってSTEM像強度が上昇した領域が配列している. 図3(e)に示す拡大像より, 当該領域はキング界面上のa転位に対応しており, Shockley部分転位への

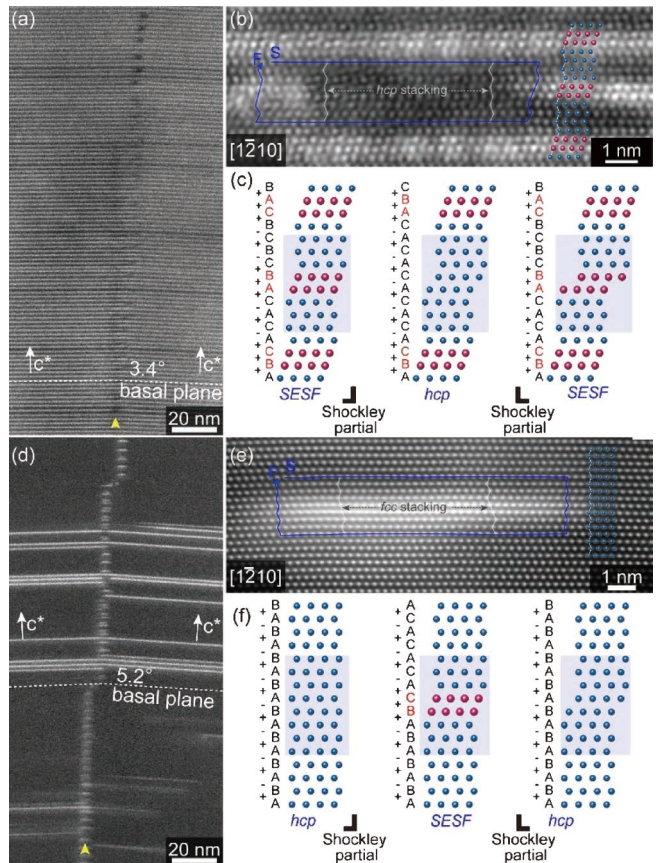


図3 (a), (b)LPSO型Mg合金および(c), (d)MFS型Mg合金 押出材のキング界面近傍HAADF-STEM像. (オンラインカラー)

拡張に伴う積層変化(hcp→fcc)によって, LPSO型の場合とは反対に添加元素濃度が上昇したと考えられる. 図3(f)に示す模式図の通り, MFS型Mg合金におけるキング界面上の転位はナノスケールのSESFを導入した構造として理解できる<sup>(18)</sup>.

LPSO型・MFS型Mg合金に形成されたキング界面の構造は, a転位を伴うナノスケールのhcp-Mg構造もしくはSESF構造の導入として理解できる. 特にLPSO型Mg合金において硬質層に相当するSESF上に転位が存在することは興味深い結果である. 観察された転位構造から, 高温下でのキング界面の形成においては, H-Bモデル<sup>(9)</sup>にて想定される底面転位の運動に加えて, 溶質元素の拡散や転位の上昇運動といった, 熱活性化過程を含む構造変化が起きていることが示唆される. この考察は, 室温下で加工を施したLPSO型Mg合金では異なる偏析挙動を示すキング界面が形成されていることとも対応する<sup>(19)</sup>. また, 近年の調査では, キング変形後の試料に対して熱処理を施した場合に, 非底面方向の成分を含む転位構造の導入によるキング界面構造の緩和が示唆されており, キング変形組織の安定性に強く影響を及ぼすと考えられる. 今後, 加工条件の異なるキング界面構造の解析および, キング変形過程の動的観察等により, キング界面の構造を支配する微細構造因子および力学特性への影響が検討されることと期待される.

#### 4. セラミックス材料：MAX相におけるキンク組織・構造

MAX相とは $Ti_3SiC_2$ に代表されるようにM：遷移金属元素，A：Al, Si, Ga, Geなど，X：CまたはNの組合せからなる三元系化合物であり，セラミックス材料および金属材料のいずれにも類する特異な特性を有する材料として注目されている．MAX相の結晶構造の特徴として，結合様式の異なる層により構成される積層構造を取ることが知られている．例えば $Ti_3SiC_2$ の場合，TiおよびCにより構成される共有結合性の強い硬質層とSi元素からなる金属結合性を示す軟質層から構成されており，一種のミルフィーユ構造であるとみなすことができる．MAX相の詳細については下記文献を参照されたい<sup>(20)</sup>．

MAX相は高温下での優れた耐酸化性といったセラミックスに特有の特徴を示す一方で，高い電気伝導率といった金属に類似の特徴も示す．特に，配向制御したMAX相では，一般的なセラミックス材料では困難な室温下での塑性変形が可能である<sup>(5)</sup>．この塑性変形能については，キンク変形が変形素子として寄与していることが示唆されている．

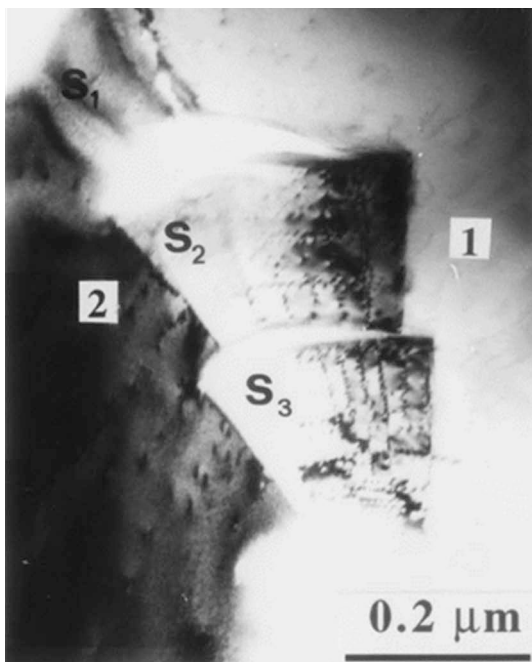


図4 (上段) $Ti_3SiC_2$ 室温圧縮材 TEM 明視野像および(下段)変形領域の模式図．文献<sup>(5)</sup>から許諾を得て一部改変して転載．

図4に室温変形後の $Ti_3SiC_2$ より取得したTEM明視野像<sup>(5)</sup>を示す．Mg合金の場合と同様に，結晶回転を伴うキンク界面が複数導入されており，像コントラストよりキンク界面に転位が配列していると推定される．MAX相におけるキンク組織の特徴として，キンク界面が導入された領域近傍において，微小な層間剥離(デラミネーション)を伴うことが挙げられる．このような空隙の形成はTEM観察等の薄膜試料に特有の現象ではなくバルク状態でも確認されている．

MAX相におけるキンク組織・構造の詳細については，近年岸田らによる精力的な研究成果が報告されている<sup>(21)</sup>．キンク界面の微細構造について，HAADF-STEM観察による解析結果を図5(a)に示す．パーガース解析により，界面上に存在する欠陥は稠密構造における底面a転位と同定され，硬質層(Ti-C)と軟質層(Si)の境界に存在することがわかる．また，上記転位は1nm程度の幅でわずかに拡張しているが，当該領域における元素偏析等は確認されない．図5(b)に示す，より回転角度の大きい，すなわちGN転位密度の高いキンク界面における転位分布についても，転位の存在する原子層および拡張幅はほぼ一定であることが確認できる．

MAX相で観察されるキンク界面構造はH-Bモデルの描像とおおよそ一致している．ただし，H-Bモデルのみでは，MAX相のキンク変形に伴うデラミネーションの導入については説明が困難である．そこで，H-Bモデルの拡張として，Strohにより提案されているモデル<sup>(22)</sup>に基づくキンク界面の分布による組織変化を考える．キンク界面が結晶粒などの変形体内部で連続的に分布している場合(図6(a))，H-Bモデルで表されるようにGN転位列として表現することができる．しかし，キンク界面が不連続に分布する場合には，結晶回転量の不連続に起因して，空隙の形成(図6(b))もしくは，非底面方向のせん断を担う欠陥の導入による緩和が必要となる．それぞれの組織は，MAX相におけるデラミネーションの形成および，Mg合金におけるc成分を含む転位構造の導入，に対応している．

一般に構造材料において空隙の形成は破壊起点として働くため，図6(b)に示すような緩和形態は変形素子として働くことは困難であると捉えられている．Barsoumらによると<sup>(23)</sup>，MAX相ではキンク界面を形成した領域ではデラミネーションも同時に導入される．デラミネーションを含む領域では，周囲の拘束を受けないことに起因して結晶回転に相

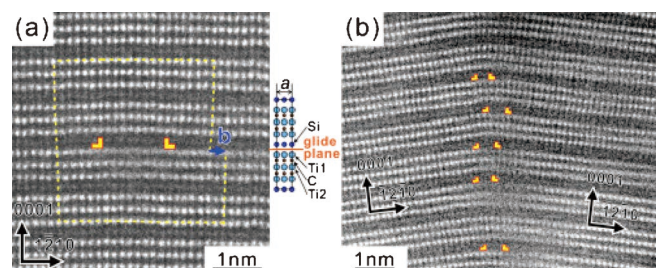


図5 室温圧縮を施した $Ti_3SiC_2$ キンク界面近傍 HAADF-STEM 像．文献<sup>(21)</sup>から許諾を得て転載．(オンラインカラー)



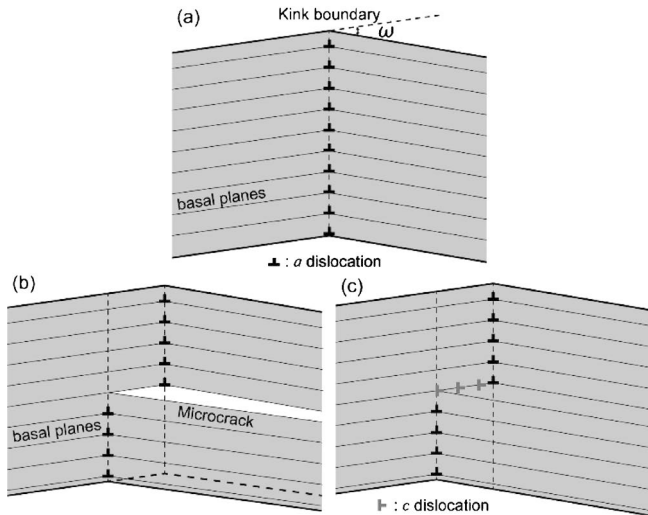


図6 キンク界面分布による組織変化模式図。

当する弾性変形(バックリング)が誘起され、キンク界面の形成がより促進される。結果として、外部応力はバックリングおよびキンク界面の形成による緩和に用いられることとなり、空隙の拡大には寄与せず、塑性変形が進展する、とされている。このような塑性変形に寄与する非底面方向のせん断もしくは空隙については、層状構造物質特有の変形素子: Ripplcation として提唱されている<sup>(23)</sup>。

## 5. 高分子材料: 液晶性ブロック共重合体におけるキンク組織・構造

### (1) 高分子材料はミルフィーユ構造の宝庫

高分子材料には硬質層と軟質層が交互に積層したミルフィーユ構造が多くみられる<sup>(24)</sup>。ポリエチレン(PE)もその1つである。PEは薄板(ラメラ)状の結晶と非晶が10 nmスケールで交互に積み重なった積層構造を形成する。ラメラ状結晶の融点はラメラ厚に依存して130~140°Cの範囲にある一方、非晶が柔らかくなるガラス転移温度( $T_g$ )は-30°Cである。したがってPEは室温で結晶が硬質層、非晶が軟質層のミルフィーユ材料になっている。PEをはじめとする結晶性高分子は、ラメラ状の結晶と非晶が交互に積層した形態を形成する。結晶の融点が100°C以上である一方、非晶の $T_g$ が室温よりも十分低ければ、室温でミルフィーユ構造を形成する。

ミルフィーユ構造を形成するもう1つの高分子材料群として2種の高分子鎖A, Bが共有結合したブロック共重合体がある。一般に高分子どうしは混ざりにくく(仲が悪く)、2種の高分子が結合しているブロック共重合体は分子鎖の大きさ(10 nm)スケールでマイクロ相分離する。相分離形態は2種の高分子の分子量比(厳密には体積比)に依存し、分子量比が1:1程度であるとラメラ状にマイクロ相分離する。例えば、ポリスチレン(PS, ガラス転移温度  $T_g = 100^\circ\text{C}$ )とポリブタジエン(PB,  $T_g = -100^\circ\text{C}$ )からなるブロック共重合体を、

分子量比を制御して合成し、ラメラ状マイクロ相分離させれば、室温でPSはガラス状態の硬質層(弾性率は $10^9$  Pa), PBはゴム状態の軟質層(同 $10^6$  Pa)を形成し、ミルフィーユ構造ができる。

ミルフィーユの積層方向が全体にわたって一方向に揃った単一ドメイン試料を用いると、試料を変形したときの構造変形(キンク形成)や応力応答が明確に捉えられる。本節では、容易に単一ドメイン試料が調製できる液晶ブロック共重合体での研究例を紹介する。液晶ブロック共重合体は構成ブロックの1つを液晶性高分子とした共重合体である。

### (2) 液晶ブロック共重合体が形成するミルフィーユ構造

液晶ブロック共重合体 B5- $x$ -EMA- $y$  は、液晶性ポリエステル BB-5(3-Me)の両端にポリ(エチルメタクリレート)(PEMA)が結合した ABA 型ブロック共重合体である(図7(a))<sup>(25)~(30)</sup>。ここで  $x$  は BB-5(3-Me)の分子量( $\text{kg mol}^{-1}$ ),  $y$  は PEMA の体積分率(%)である。BB-5(3-Me)はベンゼン環2つが連結したビフェニルと柔軟なアルキル鎖がエステル結合を介して交互に連結されたポリエステル(高分子)である。液晶性高分子には剛直棒状の液晶構造を形成するメソゲンが含まれる。BB-5(3-Me)はメソゲンであるビフェニルが一方向に並ぶ(配向する)とともに、層状に凝集してスメクチック(Sm)液晶構造を形成する<sup>(31)</sup>。分子鎖中にあるメソゲンが配向することでそれらを連結するスペーサーは伸びた形態をとる。このSm液晶は結晶化せず、 $T_g = 35^\circ\text{C}$ でガラス転移、 $150^\circ\text{C}$ で液体に相転移する。一方、PEMAは非晶性で、 $T_g$ は $70^\circ\text{C}$ である。BB-5(3-Me)のSm層法線方向のヤング率  $E$  は27 MPa, PEMAの  $E$  は1.4 MPa(100°C, 周波数1 Hzの動的粘弾性測定)であり、この液晶ブロック共重合体がラメラ状マイクロ相分離すると、100°Cでは液晶ブロックが硬質層、PEMAブロックが軟質層のミルフィーユ構造となる。

B5- $x$ -EMA- $y$  は  $y$  が20~50の幅広い組成範囲でラメラ状

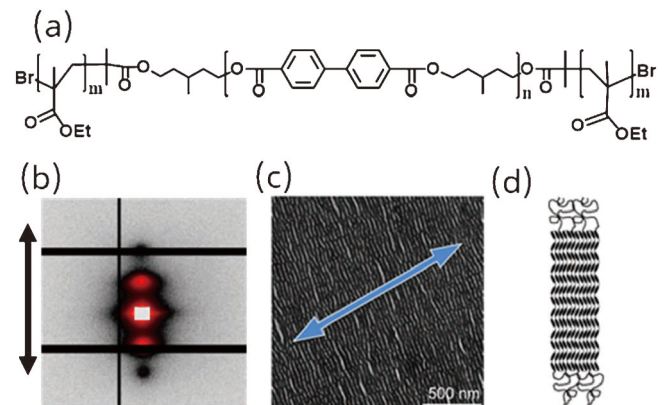


図7 B5- $x$ -EMA- $y$ の(a)化学構造式, B5-29-EMA-22フィルム試料の(b)SAXS像, (c)TEM像と(d)構造モデル。(b), (c)の矢印は延伸方向。(d)の黒い楕円体はメソゲンを示している。文献<sup>(30)</sup>から許諾を得て一部改変して転載。(オンラインカラー)



マイクロ相分離する<sup>(27)(28)</sup>. B5-29-EMA-22を溶媒に溶かした溶液をシャーレに入れ、ゆっくりと溶媒を蒸発させてフィルムを調製する. そのフィルムを160°Cで延伸, BB-5(3-Me)が液晶状態になる100°Cで熱処理して試料を調製した. 小角X線散乱(SAXS)像とTEM像から, フィルム試料内でラメラが延伸方向に積層していることが確認できる(図7(b), (c)). また, 広角X線散乱でBB-5(3-Me)のメソゲンが凝集したSm層がラメラに平行に積層していることがわかる. 以上からフィルム試料内での分子の凝集構造は図7(d)のように描くことができる. 液晶ブロック共重合体を用いることで溶融物を延伸, 熱処理するだけで, ラメラ構造が延伸方向に積層した単ドメイン・ラメラ構造のフィルム試料が調製できる. 熱処理中, 延伸で付与された液晶セグメントの配向は維持される一方, 非晶成分は移動してマイクロ相分離構造が再配向, 試料内で一様となって単ドメインが形成される<sup>(26)</sup>.

### (3) 伸長変形によるキンク形成と応力応答

B5-29-EMA-22フィルム試料を100°Cに昇温すると, BB-5(3-Me)からなる硬質層とPEMAからなる軟質層が一方に積層した単ドメイン・ミルフィーユとなる. フィルム試料を100°Cで積層方向に延伸しながら, ミルフィーユ構造の変形を放射光SAXSで観察した(図8(a)-(e)). 延伸比 $\lambda$ の増加に伴い, SAXS像は次のように変化した: 反射の数と強度が増加し(図8(b)), 反射が方位角方向に広がったのち(図8(c)), 4点にスプリットした(図8(d), (e)). 所定の $\lambda$ に延伸後, 25°Cに急冷した試料のTEM像(図8(f)-(h))から, X線反射の方位角方向への広がり, 4点スプリットが, それぞれミルフィーユ層の波うちと折れ曲がり(キンク)に対応することが分かる<sup>(29)(30)</sup>.

ミルフィーユ構造の間隔 $d$ と傾き角 $\theta_{LAM}$ をSAXS像から

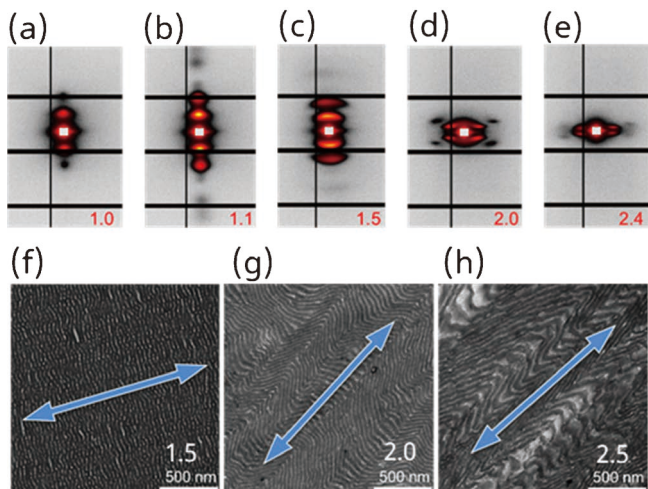


図8 B5-29-EMA-22フィルム試料の(a)-(e)SAXS像(伸長方向は上下)および(f)-(h)TEM像(矢印は伸長方向, スケールバー: 500 nm). 各パネルの右下の数字は延伸比 $\lambda$ の値. 文献<sup>(30)</sup>から許諾を得て一部改変して転載. (オンラインカラー)

決定し,  $\lambda$ に対してプロットした(図9).  $\lambda=1.0$ (未延伸)でも $\theta_{LAM}$ が20°であるのは構造の揺らぎによる.  $\lambda < 1.7$ で $\theta_{LAM}$ は25°までの増加にとどまる一方,  $d$ は31 nmから44 nmに増加する.  $\lambda > 1.7$ では,  $\theta_{LAM}$ は60°に急増(SAXSは4点スポット像に変化)したのち80°に漸近する. 一方, 増加した $d$ は減少し,  $\lambda=2.8$ で $\lambda=1.0$ での値に回復する. SAXS像と同時測定した応力-延伸比( $\sigma$ - $\lambda$ )曲線(図10)で, 公称応力 $\sigma$ は弾性領域を経て $\lambda=1.15$ で最大値0.95 MPaをとり, その後 $\lambda$ が1.6から3に至るまで一定値0.75 MPaをとる平坦領域を示す. 以上から, 弾性領域はラメラ間隔の拡大に,  $\sigma$ が最大値から一定値に減少する領域はミルフィーユ構造の波うち, 平坦領域はミルフィーユ構造の折りたたみと $\theta_{LAM}$ の増加に対応していることが分かる. 高分子ミルフィーユ構造に波うちや折りたたみが生じる(キンクが導入されると),  $\sigma$ は降伏したのち一定値を保つ.

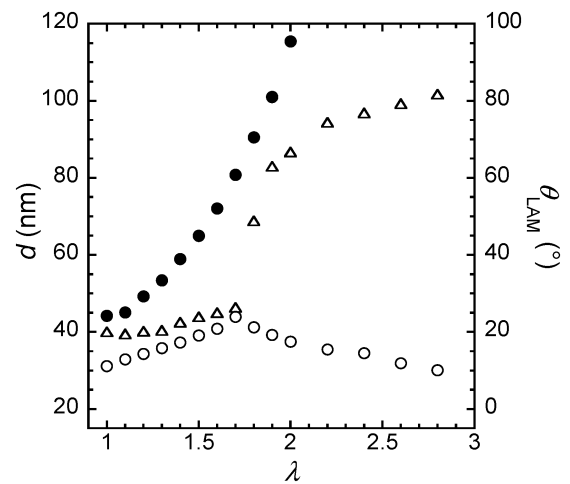


図9 B5-29-EMA-22フィルム試料の(○)ラメラ間隔 $d$ , (△)ラメラ法線が伸長方向となす角 $\theta_{LAM}$ の $\lambda$ に対する変化. ●はB5-29-EMA-44延伸フィルム試料の $d$ . 値はSAXSで決定した. 文献<sup>(30)</sup>から許諾を得て転載.

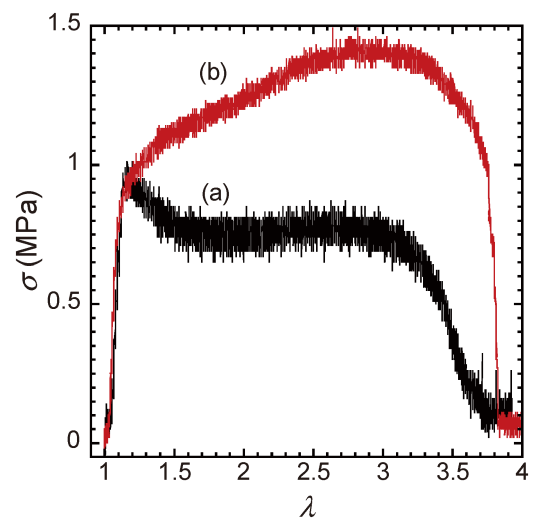


図10 (a)B5-29-EMA-22および(b)B5-29-EMA-44フィルム試料の $\sigma$ - $\lambda$ 曲線. 温度100°C, 引張速度5% min<sup>-1</sup>で測定. 文献<sup>(30)</sup>から許諾を得て転載. (オンラインカラー)

#### (4) 硬質層の広さに依存するミルフィーユの変形と応力

図10には B5-29-EMA-44 の  $\sigma$ - $\lambda$  曲線も示してある. B5-29-EMA-44 は B5-29-EMA-22 の 2 倍の非晶体積分率 (PEMA 分子量) を持ち, ラメラ構造を形成する. これら 2 つのブロック共重合体の  $\sigma$ - $\lambda$  曲線は弾性領域では重なるものの, B5-29-EMA-22 の  $\sigma$  が最大値をとって減少するのに対し, B5-29-EMA-44 の  $\sigma$  は, 増加率は小さくなるものの増加し続け,  $\lambda=2.8$  では B5-29-EMA-22 の  $\sigma$  の 2 倍にもなる. この応力応答の違いの要因は何であろうか.

B5-29-EMA-44 のミルフィーユ構造は, 広さの狭い硬質層からなっている. ラメラ状マイクロ相分離構造に由来する SAXS 反射は B5-29-EMA-22 の反射に比べると, ラメラ方向に広がっている (図11(a)). このようなラメラ方向への反射の広がり広さは広さの狭いラメラ層の積層と対応する. 狭いラメラは TEM 像で BB-5(3-Me) 鎖が凝集したラメラ (黒色のストライプ) が所々切断されていることから確認できる (図11(f)). 切断されたラメラの間には PEMA 鎖が存在する.  $y$  が大きな B5- $x$ -EMA- $y$  共重合体に見られる分断ラメラ構造である<sup>(27)</sup>.

硬質層が分断されたミルフィーユ構造を積層方向に伸ばしながら測定した SAXS 像では,  $\lambda$  の増加に伴って反射位置が小角側に移動してゆく (図11(b)-(e)). 反射位置から決定したラメラ間隔は 55 nm から 120 nm (SAXS 分解能の限界) 以上まで広がる (図10). 延伸でラメラが波うちや折りたたみ (キック形成) なしに間隔を広げる様子は TEM 像 (図11(g)-(i)) でも確認できる.

応力は高分子鎖が引っ張られて増加するのだろうか. 高分子鎖が十分に長く絡み合っていればそうかもしれない. しかし, B5-29-EMA-44 で BB-5(3-Me) の両端から 1 本ずつ成長している PEMA の分子量 (10500) は PEMA が絡み合う臨界分子量 12000 よりも小さく, PEMA 鎖が絡み合っていることはない.

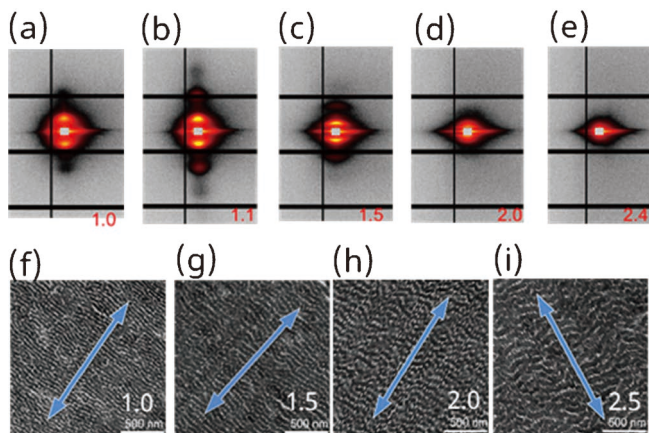


図11 B5-29-EMA-44 フィルム試料の (a)-(e) SAXS 像 (伸長方向は上下) および (f)-(i) TEM 像 (矢印は伸長方向, スケールバー: 500 nm). 各パネルの右下の数字は  $\lambda$  の値. 文献<sup>(30)</sup> から許諾を得て一部改変して転載. (オンラインカラー)

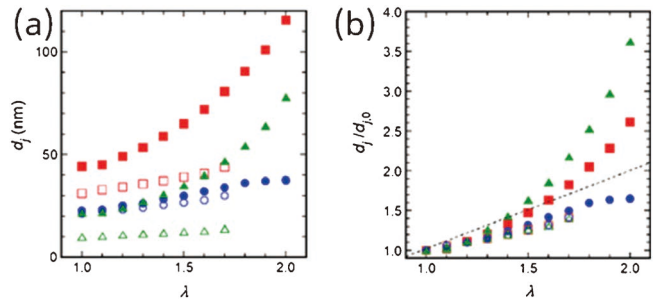


図12 (a) B5-29-EMA-44 のラメラ間隔  $d$  (■), 液晶ブロックラメラ厚  $d_{LC}$  (●) と非晶ブロックラメラ厚  $d_{am}$  (▲) の  $\lambda$  に対する変化. 白抜き印は B5-29-EMA-22 の値. (b) 伸長変形に伴う  $d$ ,  $d_{LC}$ ,  $d_{am}$  の変化. マークは (a) と同じ. 文献<sup>(30)</sup> から許諾を得て転載. (オンラインカラー)

SAXS 強度プロファイルを二相ラメラ構造モデルの散乱強度理論式でフィッティングして, BB-5(3-Me) と PEMA のラメラの厚さ ( $d_{LC}$ ,  $d_{am}$ ) を決定した (図12(a)).  $\lambda$  の増加に伴い  $d_{LC}$  に比べて  $d_{am}$  が顕著に増加する. このことは延伸前のラメラ厚との比 ( $d_{LC}/d_{LC,0}$ ,  $d_{am}/d_{am,0}$ ) で見るとより明確になる (図12(b)). B5-29-EMA-22 では  $d_{LC}/d_{LC,0}$  の値と  $d_{am}/d_{am,0}$  の値は一致しているのに対して, B5-29-EMA-44 では  $\lambda$  の増加に伴い  $d_{am}/d_{am,0}$  の値は  $d_{LC}/d_{LC,0}$  の値の 2 倍以上になり,  $d_{am}$  が  $d_{LC}$  よりも顕著に増加していることが分かる. TEM 像を見ても明るいストライプ (PEMA 層) のほうがより厚くなっている. 厚くなった PEMA 層はより伸ばした PEMA 鎖で充填される. 応力の増加は PEMA 鎖が伸長することで失ったエントロピーに起因すると考える.

#### (5) まとめ

液晶ブロック共重合体が形成する単一ドメイン・ミルフィーユを積層方向に伸長変形させながら SAXS と  $\sigma$  の同時測定を行い, ミルフィーユの変形 (キック導入) と応力応答との関係を調査した. キック導入 (ラメラ層の波うち) は  $\sigma$  の降伏を伴った.  $\sigma$  が降伏後一定値をとる間, 層はより大きく傾いた. 硬質層が狭いミルフィーユでは,  $\lambda$  の増加に伴いキックが導入されないうまま,  $d$  は拡大,  $\sigma$  は増加し続けた. この  $\sigma$  の増加は, 硬質層よりも顕著に厚さを増加させる軟質層を形成する高分子鎖のエントロピー損失に由来すると考えた.

## 6. おわりに

金属材料・セラミックス材料・高分子材料の代表的なキック組織・構造の解析現状を概説した. 金属材料・セラミックス材料から発案された「ミルフィーユ構造」「キック強化」であったが, その視点から改めて高分子材料を捉えたとき, built-in での微視的ミルフィーユ構造の形成や, 多数の系でのキック形態の報告例等, 宝の山であったことは本稿で述べられている通りである. 結晶性高分子材料では, ミクロなせん断変形 (すべり面) が分子鎖方向に限定されていることを考えると, 元々キック変形を生じやすい物質であるとも言え



## キンク形成とキンク強化の結晶塑性解析

眞山 剛\* 只野 裕一\*\*

## 1. はじめに

キンク変形帯は、そのせん断方向がキンク界面と垂直に近く大きな回転を伴う変形の局所化領域として特徴付けられる。キンク帯の形成を固体力学の手法を用いて解析・理解する試みは古くから行われており、特に結晶スケールの変形機構を考慮した結晶塑性解析手法を用いた解析は、キンク帯形成を合理的に説明できるものとして有用である<sup>(1)-(4)</sup>。しかしながら、実験的に顕著なキンク帯形成が認められている塑性異方性の強い材料における現象の理解は不十分であり、さらに長周期積層(LPSO)型マグネシウム(Mg)合金で実験的に確認されているキンク強化<sup>(3)</sup>を対象とした研究は限定的である。したがって、結晶塑性解析により結晶スケールにおけるキンク形成機構と強化機構を解明し、キンク強化と他の強化機構の相違点と類似点を明らかにすることで、キンク強化を最大限に活用した材料創成に貢献することが期待される。

本稿では、まず第2章で塑性異方性の強い材料系におけるキンク形成の解析結果について示す。続く第3章では、キンク強化機構の解明を目指した結晶塑性解析について概説する。格子欠陥の影響を導入した高次勾配結晶塑性モデルによる解析を通じて、キンク強化に寄与する要因の検討と、キンクの形態がキンク強化に及ぼす影響について検討する。

## 2. キンク形成の結晶塑性解析

本章では結晶塑性有限要素法によるキンク形成に関する解析例として、マグネシウムのように塑性異方性の強い最密六方晶(HCP)金属に加えて、塑性異方性は小さいものの強度

が著しく異なる2相が層状に積層した層状構造体(ミルフィーユ構造体)におけるキンク帯形成解析結果を示し、その類似性と相違点等について概説する。本節で示す解析は、古典的な速度依存型結晶塑性構成則を静的陽解法有限要素法に導入した解析手法を用いて実施したものであるが、その詳細については文献<sup>(4)-(7)</sup>を参照頂きたい。

(1) HCP 金属の底面すべりにより形成されるキンク帯<sup>(7)</sup>

図1は底面すべり系が支配的に活動するHCP金属におけるキンク帯形成に及ぼす負荷方位依存性を示している。本解析では図1(a)に示すように、負荷方向を $[11\bar{2}0]$ から角度 $\theta_{\text{ini}}$ だけ底面が傾いた結晶方位に対して $z$ 軸圧縮を与えている。図1(b)は圧縮負荷時の応力-ひずみ曲線、図1(c)は圧縮ひずみ1%時の形状変化と累積すべり分布を示している。まず $\theta_{\text{ini}}=3^\circ$ の結果に着目すると、応力-ひずみ挙動としては塑性変形の開始直後に急激な軟化を示した後、ほぼ一定の応力で変形が進行しており、図1(c)に示す1%変形後のコンター図からは試料中央付近に著しくすべりが蓄積した変形帯が形成され、明確な屈曲を伴う形状変化が生じていることがわかる。変形帯の境界面が底面すべり系のせん断方向( $z$ 軸方向)と垂直に近いこと、さらにここには示していないがすべりが蓄積した領域において大きな結晶回転が生じていることから、ここで形成された変形帯がキンク帯に対応するものと解釈することができる。すなわち、キンク帯内の大きな結晶格子回転は底面すべり系のシュミット因子を増加させ、その結果図1(b)にみられた顕著な応力の低下(幾何学的軟化)を引き起こしたものと考えられる。これは、数値解析において仮想的に結晶格子回転を考慮しない計算を実施すると、キンクの形成が著しく抑制されることから確認されている<sup>(7)</sup>。

\* 熊本大学先進マグネシウム国際研究センター；准教授

\*\* 佐賀大学理工学部機械工学部門；教授

Crystal Plasticity Analysis for Kink Band Formation and Kink Strengthening; Tsuyoshi Mayama\* and Yuichi Tadano\*\* (\*Magnesium Research Center, Kumamoto University, Kumamoto. \*\*Department of Mechanical Engineering, Saga University, Saga)

Keywords: *kink, crystal plasticity, deformation, anisotropy, finite element analysis*

2022年4月20日受理[doi:10.2320/materia.61.558]



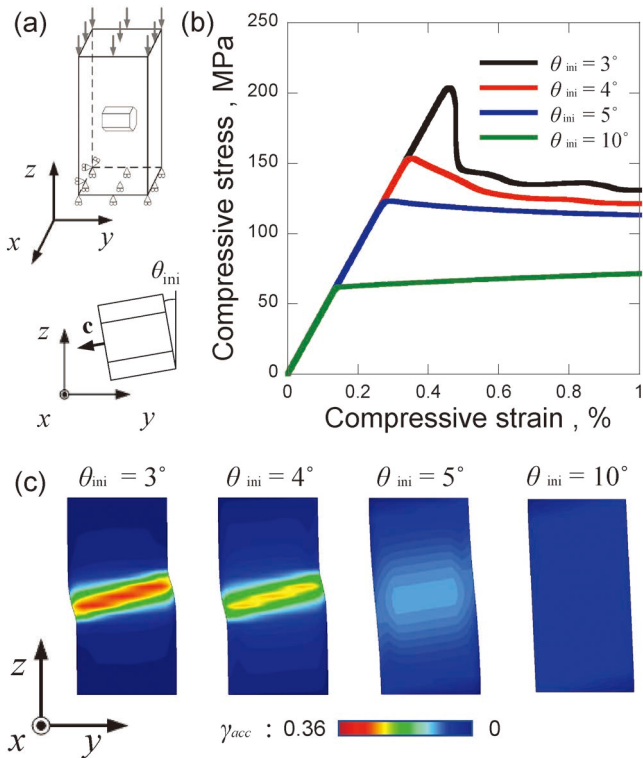


図1 底面すべりによるキンク帯形成<sup>(7)</sup>, (a) 解析モデル, (b) 応力-ひずみ挙動, (c) 累積すべり分布. (オンラインカラー)

次に  $\theta_{ini}$  が解析結果に及ぼす影響に注目すると,  $\theta_{ini}$  が大きくなるにつれて図1(b)に示す応力-ひずみ挙動における応力の低下量が小さくなり, さらに図1(c)に示す底面すべりの局所化が弱まることがわかる. これは, 底面すべり系のシュミット因子が大きくなると, 変形初期から試料全体が比較的一様に変形することにより, 幾何学的軟化による変形局所化が抑制されることに起因している. すなわち, 塑性異方性が強く, シュミット因子が小さなすべり系が活動することが顕著なキンク帯形成を引き起こす要因であると考えられる.

## (2) HCP 金属の柱面すべりにより形成されるキンク帯<sup>(8)</sup>

図2は底面と平行に圧縮した際に柱面すべり系が活動した場合のキンク帯形成に関する解析結果を示している. この解析では図2(a)に示すように $[10\bar{1}0]$ 圧縮から $c$ 軸周りに $\theta_{ini} = 5^\circ, 15^\circ, 25^\circ$ 回転させた初期方位に対する $z$ 軸圧縮解析を実施し, 圧縮ひずみ9%における粒内方位差分布(図2(b))と柱面すべり系の累積すべり分布(図2(c))を比較し, 柱面すべりにより形成されるキンク帯の負荷方位依存性を検討している.

まず  $\theta_{ini} = 5^\circ$ の結果に注目すると, 図2(b)より大きな粒内方位差を持つ領域が帯状に形成されていることがわかる. また図2(c)に示す柱面すべり系の累積すべり分布からは, 破線で囲んだ領域において顕著なすべりの局所化が生じていることもわかる. これらの結果と結晶方位より, すべりが局所化した帯状の領域は柱面すべり系 PRI1 のせん断方向と垂直

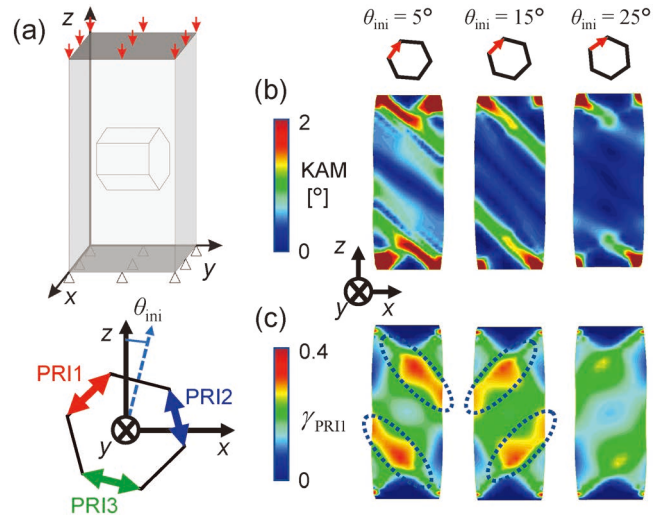


図2 柱面すべりによるキンク帯形成<sup>(8)</sup>, (a) 解析モデル, (b) 粒内方位差分布, (c) 累積すべり分布. (オンラインカラー)

に近い境界面を持つことがわかる. さらに柱面すべり系の局所化領域を挟むように大きな粒内方位差領域が帯状に発達していることから,  $\theta_{ini} = 5^\circ$ に見られる変形の局所化領域はキンク帯に対応するものと考えられる. 一方, 図2(c)の  $\theta_{ini} = 15^\circ$ では, PRI1 のせん断方向と平行に近い方向に柱面すべりの活動が大きな領域が広がっているが, 図2(b)においてはそれに対応する粒内方位差分布が確認されない. このようなすべりの局所化領域はすべり帯に対応するものと考えられる. さらに,  $\theta_{ini} = 25^\circ$ の場合には, 粒内方位差分布および柱面すべり分布のいずれにおいても比較的局所化の程度が小さい. これは2つの柱面すべり系 PRI1 と PRI3 のシュミット因子が比較的近いことにより, 2重すべりにより変形が進行し, その2つのすべり系の活動による格子回転が互いに打ち消し合うことによるものと考えられる.

以上に示したように, 底面と平行に圧縮荷重を受ける際は, 前節の底面すべり系が活動する場合とは異なり, 等価な複数の柱面が存在することにより, その負荷方位依存性は複数のすべり系の競合を考える必要がある. このような競合は非等価なすべり系間でも生じ得るものであり, 純Znにおける底面すべり系と2次錘面すべり系の競合により形成されるキンク帯についても報告されている<sup>(9)</sup>.

## (3) 硬質/軟質層からなる積層構造体におけるキンク形成

図3は同じFCCの結晶構造を持ち初期降伏応力が10倍異なる硬質層と軟質層からなる積層構造体を想定したモデル材料の圧縮解析結果を示している. ここでは, 両層ともに1つのすべり系のシュミット因子が0.5となる同一初期方位を設定している. 図3の応力-ひずみ曲線より, 塑性変形の初期には応力が徐々に増加し, 圧縮ひずみ15%程度から顕著な軟化が生じていることがわかる. また, 図中に示したコンター図は25%変形時の形状と相当ひずみ分布であり, 軟質層により大きなひずみが導入されると共に顕著な屈曲が生じ

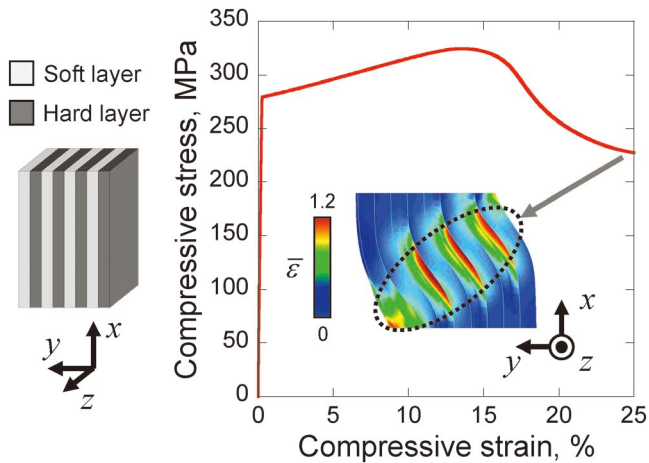


図3 積層構造体におけるキンク帯形成。(オンラインカラー)

ている。

本積層構造体は前節までに示した例とは異なり、構成相の FCC 結晶は塑性異方性が小さい。しかしながら、硬質層と軟質層の強度が大きく異なるため、軟質層側の大きな塑性変形が生じる一方で、硬質層側は小さな塑性変形で大きな圧縮変形を引き起こすことのできる弾性的な曲げが主に生じている。これは、軟質層を主な塑性変形媒体として硬質層間が相対的にずれたと見做し、硬質/軟質層界面と平行なすべり面を持つ構造体として粗視化することで、前2節と同様に塑性異方性の強い材料におけるキンク帯形成と同様に解釈することが可能である。

本節では同じ結晶方位を持つ FCC 結晶を構成相とする積層構造体を想定したが、例えば金属における代表的な積層構造体である共晶合金では、異なる結晶構造が特定の方位関係を持つことも多い。さらに各相の特性比や配置等の組み合わせによってもキンク帯の形成頻度が著しく異なることが予想される。このように多数のパラメータを含む積層構造体におけるキンク挙動を実験的に調査することは容易では無いため、結晶塑性有限要素法による数値的探査による支援が特に有用であると考えられる。

### 3. キンク強化の結晶塑性解析

#### (1) 解析方法

前章ではキンク形成について、メソスケール材料モデルである結晶塑性モデルにより解析例を示したが、本章ではキンクが導入された材料における材料強化発現について、結晶塑性モデルによって表現した解析例を示す。キンク強化の発現には、転位運動を阻害する結晶格子欠陥の存在が重要な役割を果たすと考えられるため、幾何学的に必要な転位 (Geometrically Necessary Dislocation; GND) をすべりの勾配として結晶塑性モデルに導入した、高次勾配結晶塑性モデルを用いる。高次勾配結晶塑性モデルの一形式として本章では、GN 転位密度を新たな独立変数とすることで、変位と GN 転位

密度のそれぞれについて支配方程式を導出した材料モデルを導入した<sup>(10)(11)</sup>。本モデルは、メソスケールにおける LPSO 型マグネシウム合金のキンク強化を表現するのに有効であると考えられるが、連続体解析で広く用いられている有限要素法を用いた数値解析を本モデルに適用した場合、両支配方程式に対して同じ有限要素を用いる、すなわち同じ内挿関数と積分方法を用いると、適切な解が得られない場合があることが報告されている<sup>(12)</sup>。そこで、メッシュフリー法と呼ばれる数値計算手法のひとつである Reproducing Kernel Particle Method (RKPM)<sup>(13)(14)</sup>を導入した。これにより、高次勾配結晶塑性解析の解析精度向上と安定化を図ることができる<sup>(15)</sup>。

#### (2) 解析条件

実験的に観察されるキンクにはさまざまな形態のものが存在し、キンクの形態や変形モードによってキンク強化の様相は異なると考えられる。本章では一例として、正方形形状の試験片にキンク帯を導入した LPSO 型マグネシウム合金に対する単純せん断解析を実施し、キンクの形態とキンク強化の相関について評価した結果を紹介する。解析モデルの模式図を図4に示す。LPSO 型マグネシウム合金を想定していることから、すべり系は底面に限定し、母相の底面が圧縮方向に対して垂直であるとしている。試験片中央部にキンク帯を導入し、キンク帯と母相のなす角  $\theta$  をキンク角と定義した。キンクは双晶とは異なり、キンク角の大きさに幾何学的な制約はないため、様々なキンク角を持つキンクが存在し得る。そこで、キンク角を変化させた複数のモデルを解析することで、キンク形態の違いがキンク強化にどのような影響を及ぼすかを数値的に調査した。境界条件として母相の底面と同方向にせん断力を加え、得られる流れ応力を評価する。

前述の通り、キンク強化には格子欠陥が重要な役割を果たすと考えられる。ここで使用する高次勾配結晶塑性モデルでは、すべりの勾配から格子欠陥である GN 転位密度が算出され、これが背応力を介して材料挙動に影響を及ぼすモデルである。この格子欠陥がキンク強化に及ぼす影響を評価するために、高次勾配の影響を考慮しない従来の結晶塑性モデルによる数値解析もあわせて実施することで、格子欠陥がキンク強化に及ぼす影響について定量的に調査する。

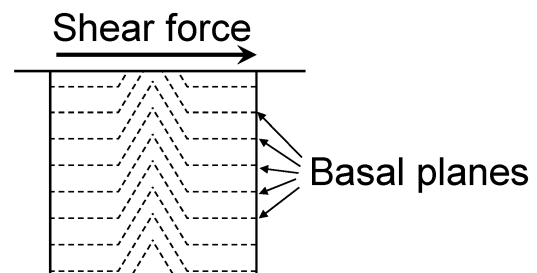


図4 キンク帯を導入した解析モデル。

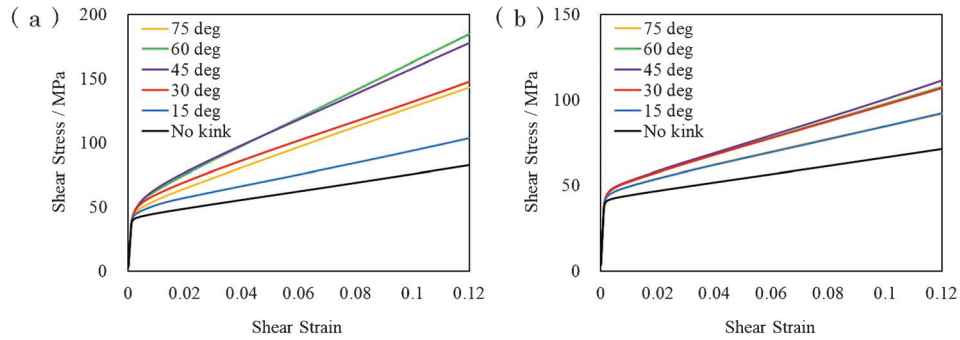


図5 キンク帯を導入した試験片の応力-ひずみ挙動, (a) 高次勾配結晶塑性モデル, (b) 従来型結晶塑性モデル. (オンラインカラー)

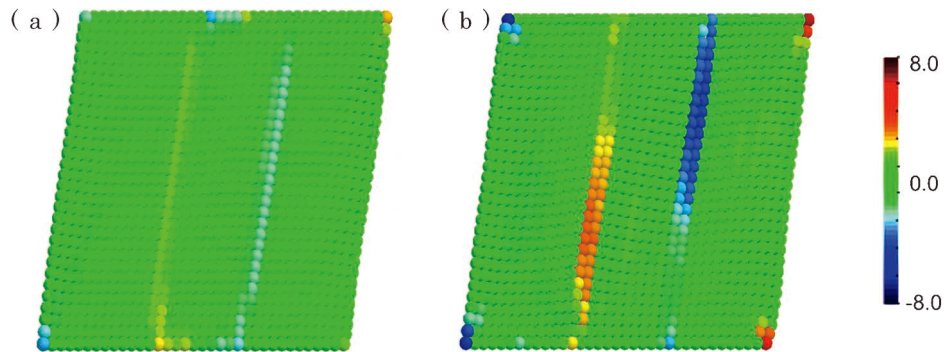


図6 変形状とGN転位密度分布, (a) キンク角  $\theta=15^\circ$ , (b) キンク角  $\theta=75^\circ$ . (オンラインカラー)

### (3) 解析結果

キンク角を  $\theta=15^\circ$  から  $\theta=150^\circ$  まで変化させて得られた応力-ひずみ挙動を, 図5(a)に示す. 比較のために, キンクが存在しない条件(解析領域全体が全てせん断方向と平行な底面を有する条件)による解析も併せて実施した(図5(b)). いずれのキンク角の場合も, キンクを導入しない場合と比較すると高い流れ応力を示すことが確認でき, これがキンク強化に対応していると考えられる. また, キンク角とキンク強化には明瞭な相関があることが確認できる. 図5(b)より, 格子欠陥を考慮しない従来型の結晶塑性モデルを用いた解析でも, キンク強化は発現することが確認される. これは, キンク領域の結晶方位が母相と異なることからシュミット因子が変化し, これによる流れ応力の変化が生じたためである. これは, 従来から知られている幾何学的硬化と対応付けることができる. 一方で, いずれのキンク角においても, 高次勾配結晶塑性モデルは従来型結晶塑性モデルよりもさらに高い流れ応力を示している. 幾何学的硬化による強化は, 両モデルに等しく発現するため, 両モデルによる流れ応力の差異は高次勾配結晶塑性モデルにのみ導入されている格子欠陥に起因する背応力によるものである. すなわち, キンク強化は幾何学的硬化と格子欠陥の存在の2つの要因によって引き起こされると推察される.

キンク角  $\theta=15^\circ$  および  $\theta=75^\circ$  に対して, 高次勾配結晶塑性モデルによって得られたGN転位密度分布を図6に示す. 図5に示したように,  $\theta=15^\circ$ と比較して  $\theta=75^\circ$ はより

高いキンク強化が得られる条件である. いずれの条件においても, 解析領域中央に導入したキンクと母相の境界付近にGN転位密度の蓄積がみられるが, これはキンク界面においてすべり方向が大きく変化するためすべりの勾配が生じ, GN転位が蓄積することによる. このGN転位密度による背応力の増大が, 流れ応力の上昇を引き起こしている. また, 図6(a)と(b)を比較するとGN転位密度の大きさが異なり, キンク強化がより大きく得られる  $\theta=75^\circ$ ではGN転位密度も高く発生している. すなわち, キンク境界周辺により多くの格子欠陥が導入される条件において, キンク強化はより顕著に発現すると考えられる.

キンク形態とキンク強化の相関をより詳しく検討するため, キンク角とせん断ひずみ24%における流れ応力の相関を図7に示す. 前述の通り, キンク角とキンク強化には明瞭な相関が見られ, 本条件ではキンク角  $\theta=75^\circ$ 付近でキンク強化は最大となる. このことは, キンク強化に最適なキンク形態が存在する可能性を示唆している. また, 高次勾配結晶塑性モデルと従来型結晶塑性モデルによる結果を比較すると, キンク角とキンク強化の相関の傾向はほぼ一致しているが, 強化量は高次勾配結晶塑性モデルによるものが全ての条件において高い結果を示す. 前述の通り, 両モデルの差は格子欠陥によるキンク強化の度合いであると考えられるが, 本条件においては, いずれのキンク角に対しても幾何学的硬化と比較して格子欠陥のキンク強化への寄与が大きくなっていることが確認された. 以上より, 幾何学的硬化, 格子欠陥のいずれもキンク強化の発現メカニズムであると考えられる







# 幾何学的理論に基づくキンク変形のモデリングと解析

稲 邑 朋 也\* 垂 水 竜 一\*\*

## 1. 緒 言

長周期積層構造 (Long Period Stacking Order: LPSO) 型の Mg 合金を圧縮変形すると、キンク変形と呼ばれる特異な塑性変形が生じる<sup>(1)</sup>。図 1 はキンク変形によって生じる 3 つの形態であるキンクバンド、Ridge キンク、Ortho キンクを模式的に表している。物体に描かれた縦線はすべり面を表しており、すべり面上でのせん断変形と剛体回転が同時に起こり、キンクバンドやそれらが結合した特徴的な変形組織が出現する。キンク変形は、マクロには塑性座屈に類似した屈曲形態を有しており、塑性ひずみはキンクバンドに集中する。一方、ミクロには、Hess と Barrett<sup>(2)</sup> が提唱したような傾角

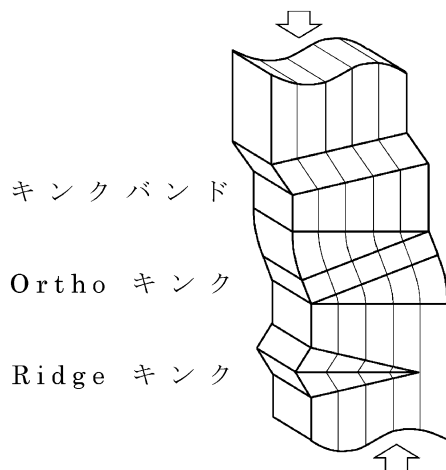


図1 キンクバンド、Ortho キンク、Ridge キンクの模式図。

粒界状のシャープな界面を持っており<sup>(3)</sup>、この界面を挟んで明瞭な結晶回転が発生する。

金属のキンク変形は1942年に Orowan によって Cd 単結晶において発見されたが<sup>(4)</sup>、材料工学的な価値が見出されなかったこともあり、その後研究が活性化されることはなく、現在に至ってもキンク変形の基礎研究は欠落している。ところが近年、熱間加工によって多量のキンク変形が導入された LPSO-Mg 合金が高い強度を持つことが発見され<sup>(5)</sup>、キンクバンドの存在自体が材料強化に寄与していることが明らかになっている<sup>(6)</sup>。この「キンク強化」の機構を解明するためには、まずキンク組織の幾何学的な特徴を明確にする必要がある。

著者らは、新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」において、ミルフィーユ構造体に生じるキンク変形の形成機構、およびそれに伴う材料強化機構の理論構築を進めている。この理論解析の要点は、キンクを対象とした幾何学と力学の相関解明、すなわち、キンクの持つ特異な変形形態を幾何学的に特徴付けるとともに、その帰結として発現する力学特性を明らかにすることである。この一連の解析では、これまで材料科学分野で多用されてきた線形近似(線形弾性理論)は適用できず、これを一般化した連続体力学が必須である。また、通常のユークリッド空間内で得られる知見は多分に限定的となるため、詳細な力学特性の理解には多様体上の弾塑性理論が有用である。換言すると、キンク変形を理解し、実材料の新しい強化機構として応用するためには、既存の枠組みに囚われない新しい学術理論の構築が必要である。

本稿では、これまで著者等が進めてきた理論解析の現状について説明する。解析手法は何れも連続体力学を基盤としている。前半では、Rank-1 接続を応用したキンク変形の形態

\* 東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所；教授(〒226-8503 横浜市緑区長津田町4259)

\*\* 大阪大学 大学院基礎工学研究科；教授

Modeling and Analysis of Kink Deformation Based on Geometry; Tomonari Inamura\* and Ryuichi Tarumi\*\* (\*Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Yokohama. \*\*School/Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka)

Keywords: continuity of deformation, disclination, differential geometry, Riemann-Cartan manifold

2022年5月31日受理[doi:10.2320/materia.61.563]

解析について取り上げる。これはキンク変形をアフィン変形として捉えた際に、キンク界面において不連続な変形勾配を接続して変形の連続性を保持するための必要十分条件である。

Rank-1 接続解析によって、材料内部に埋め込まれたキンクバンド結合部は不可避免的に回位を伴うことが示される。また、複雑なキンク組織の形成とその変形には、キンク界面の移動に関わる外部仕事が必要となり、これが強化機構の一因となることを述べる。一方、後半では微分幾何学を用いたキンク解析について概説する。ミクロなキンク界面は刃状転位列としてモデル化できるが、格子欠陥の微分幾何学を用いることで、任意のキンク組織を Riemann–Cartan 多様体としてモデル化することができる。ここでは数値解析の一例として Ortho 型と Ridge 型の二つのキンクを取り上げ、Ridge 型キンクの近傍には、回位による顕著な応力集中が生じることを示す。

## 2. 変形の連続性に基づくキンク変形の記述

### (1) 変形の連続性

キンク変形を幾何学的にモデル化するにあたって、まずはキンクバンドの観察結果<sup>(7)</sup>から読み取ることのできる特徴、すなわち①キンク変形部は平均的には(すくなくとも区分的には)均一な変形を被る、②シャープなキンク界面を介して結晶回転が生じる、③試料表面のケガキ線がシャープなキンク界面で途切れない、の3点は注目に値する。特に③はキンク界面では変形の連続性が保たれることを意味している。

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4-\delta^2}{4+\delta^2} & \frac{4\delta}{4+\delta^2} \\ 0 & \frac{-4\delta}{4+\delta^2} & \frac{4-\delta^2}{4+\delta^2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \frac{\sqrt{4+\sigma^2}}{4+\delta^2} \begin{pmatrix} 0 \\ -\delta^2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{4+\sigma^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ \sigma \end{pmatrix} \quad (4)$$

の2つの解が得られることが証明されている<sup>(9)</sup>。ここで  $\delta = s_2 - s_1$ ,  $\sigma = s_1 + s_2$  である。式(3)の解はすべり量の異なる2領域がすべり面  $\mathbf{e}_z$  を介して結合した状態を表しており、領域2が領域1に対してすべり量  $\delta$  だけ相対的に  $\mathbf{e}_y$  方向に滑った、単純なすべり変形を表している。それに対して解(4)は、領域2がゼロでない結晶回転  $\mathbf{Q}$  を被り、すべり面ではない面  $\hat{\mathbf{m}}$  で領域1と結合している。解(4)を用いると典型的なキンク形態であるキンクバンド、Ridge キンク、Ortho キンクの幾何学を知ることができる。詳細は文献(9)に譲り次節で主要な結果を述べる。

### (2) キンクバンド

解(4)において、 $s_1=0$ ,  $s_2=s$  とすればキンクバンドが得られる。図2(a)に得られるキンクバンドの模式図を示す。キンクバンド内の結晶回転量を  $\theta$ 、キンク界面法線と  $\mathbf{e}_y$  軸のなす角を  $\phi$  とする。 $\theta, \phi$  の  $s$  依存性を図2(b)に示す。 $s$  に依存せず  $\theta=2\phi$  であることからキンク界面はつねに対称傾

キンク組織は、ただひとつのすべり系しか作動できない結晶塑性系において、変形量の異なる2領域が変形の連続性を保ちながら結合したものと捉えることができる。また、キンク内部の結晶回転は数十度に及ぶ。こうしたキンクバンドが複雑に連結した幾何構造がキンク組織であることから、キンク組織の幾何を正確に捉えるためには、幾何学的非線形性を考慮した定式化が必要である。

キンクバンドを構成する2領域のアフィン変形をそれぞれ  $\mathbf{y} = \mathbf{S}_1\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y} = \mathbf{S}_2\mathbf{x}$  とする。このとき、2領域が単一の界面において連続接続されるための必要十分条件は、与えられた変形勾配行列  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$  に対して

$$\mathbf{Q}\mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_1 = \mathbf{b} \otimes \hat{\mathbf{m}} \quad (1)$$

が解  $(\mathbf{Q}, \mathbf{b}, \hat{\mathbf{m}})$  を持つことである<sup>(8)</sup>。ここで  $\mathbf{Q}$  は領域2に要求される剛体回転、 $\mathbf{b}$  は両領域の相対的な変形方向および量に関わるベクトル、 $\hat{\mathbf{m}}$  は両領域の結合面単位法線ベクトルである。この条件は Rank-1 接続、Kinematic compatibility, Hadamard jump condition などと呼ばれており解法は Ball と James により明らかにされている<sup>(8)</sup>。単一のすべり系によって構成されるキンク変形の場合、単位行列を  $\mathbf{I}$ 、すべり面単位法線ベクトルを  $\mathbf{e}_z$ 、すべり方向の単位ベクトルを  $\mathbf{e}_y$  とすると、変形勾配  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$  はすべり量を表す相異なる実数 ( $s_1, s_2$ ) を用いて、

$$\mathbf{S}_1 = \mathbf{I} + s_1 \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{S}_2 = \mathbf{I} + s_2 \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_z \quad (2)$$

である。このとき、 $s_1 = s_2$  を除く任意の  $s_1, s_2$  において、

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{b} = \delta \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{m} = \mathbf{e}_z, \quad \text{および} \quad (3)$$

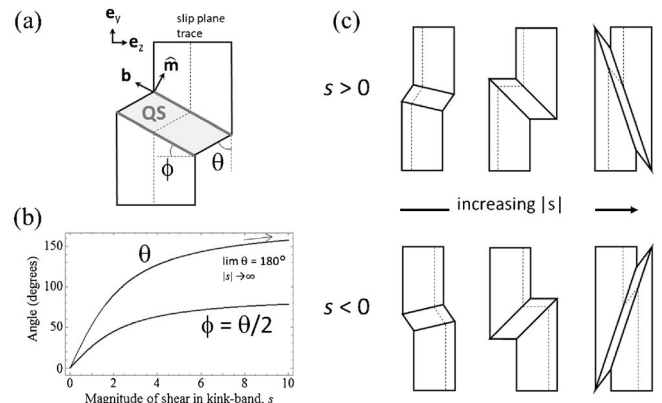


図2 Rank-1 接続から求められるキンクバンド。

(a)はキンクバンドを表す解の模式図でありすべり面の回転角を  $\theta$ 、 $\mathbf{e}_y$  面とキンク界面がなす角を  $\phi$  とすると、(b)のように  $\phi = \theta/2$  でありキンク界面を介してすべり面が対称傾角の関係になる。キンクバンドを形成するすべり  $s$  の符号が異なると(c)に示す様に  $\mathbf{e}_y$  面に対して鏡像関係にあるキンクバンドが得られる。後述するように Ridge キンクは  $s$  の符号が異なるキンクバンドが結合したものである。

角粒界となることが保証され、刃状転位列による Hess-Barrett 型のキंक界面の描像<sup>(2)</sup>と一致する。また  $s$  の増加に伴い  $\theta, \phi$  は増加し、 $\lim_{s \rightarrow \infty} \theta = 180^\circ$  である。  $s$  の絶対値および符号に応じてキंक形態は図 2(c) の様に変化する。これらの特徴は実際に観察されるキंकバンドの特徴と定量的に一致する<sup>(9)</sup>。キंकバンドが物体を貫通していない場合には、キंकバンド先端には正負の回位対が形成され<sup>(10)</sup>、その強度は  $\theta$  に等しく、  $s$  の値に応じて  $0^\circ$  から  $180^\circ$  までのあらゆる値をとり得る。

### (3) Ridge キंकと Ortho キंक

キंक変形により形成される組織はキंकバンド同士が結合したものである。個々のキंकバンドはマトリクスと Rank-1 接続していると考え、キंकバンド同士の結合には必然的に回位が発生することが示される。

Ridge キंकは符号の異なるゼロでないせん断変形によって形成された 2 つのキंकバンドが結合したものであり、  $s_1 s_2 < 0$  である。図 3(a) に示すようにすべり方向の異なるせん断変形  $S_1, S_2$  が働き、図 3(b) に示すような 1 対のキंकバンドが形成されるとする。各キंकバンドはマトリクスと Rank-1 接続され、

$$Q_1 S_1 - I = a_1 \otimes \hat{n}_1 \quad (5)$$

$$Q_2 S_2 - I = a_2 \otimes \hat{n}_2 \quad (6)$$

である。しかし Ridge キंकとなるためにはキंकバンド同士も Rank-1 接続されなくてはならないので、さらに次式が要求される。

$$W Q_2 S_2 - Q_1 S_1 = b \otimes \hat{m} \quad (7)$$

ところが、回転  $W$  による回転角  $\omega$  が 0 になるためには  $s_1 = s_2, s_1 = 0, s_2 = 0$  でなければならず、Ridge キंकの条件： $s_1 s_2 < 0$  に反する。つまり Ridge キंकには角度  $\omega$  の空隙が必ず出現する。 $\omega$  は  $s_1, s_2$  の関数であり次式で与えられる ( $\delta$  の定義は 2.(1)節と同じ)。

$$|\omega| = \cos^{-1} \frac{4(s_1^2 + s_2^2 - s_1 s_2 + 4)^2 - s_1^2 s_2^2 \delta^2}{(4 + s_1^2)(4 + s_2^2)(4 + \delta^2)} \quad (8)$$

Ortho キंकの場合も同様に考えることができる。Ortho キंकはゼロでない相異なる同符号の  $s_1$  と  $s_2$  によって形成された 2 つのキंकバンドの結合によって形成される ( $s_1 \neq s_2, s_1 s_2 > 0$ )。図 3(c) に示すように Ortho キंकにおいても Ridge キंकの場合と同様に角度  $\omega$  の空隙が必ず出現する。

Ridge, Ortho 共にキंकバンド同士の結合面が物体を貫通していれば、結合面を境にして一方が  $W$  の回転を被ればすべての界面で Rank-1 接続が保たれるが、結合面が物体内部に存在する場合には角度  $\omega$  の空隙を埋めるために、必ず回位対が発生することになる。その回位強度は式 (8) で与えられ、フランクベクトルは  $e_x$  に平行である。図 4 に回位強度  $\omega$  の  $s_1, s_2$  依存性を示す。Ridge キंकは  $s_1, s_2$  が異符号の領域に対応し、Ortho キंकは  $s_1$  と  $s_2$  が同符号の領域に対応する。いずれの場合もフランクベクトル  $w$  は

$$w = \begin{pmatrix} |\omega| t \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad t = \text{sign}(s_1 s_2 \delta (\delta^2 + s_1 s_2 + 4)),$$

である。この図から明らかな様に、キंकバンド同士の結合によって生じる回位の大きさもまた、幾何学的には  $0^\circ$  から  $180^\circ$  までのあらゆる値をとり得る。これらの回位は幾何学

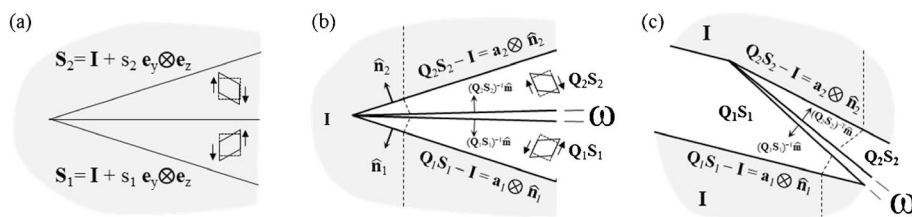


図 3 Ridge キंकおよび Ortho キंकの模式図。

(a) は Ridge キंकの基準配置であり、未変形部と変形部での変形の連続性が保たれているとせん断部には回転が作用せざるを得ず (b) の現配置を得る。上下のキंकバンド間には不可避免的にゼロでない回転性のギャップ ( $\omega$ ) が発生する。(c) は同様の考え方で得られる Ortho キंकの現配置であり、キंकバンド間には角度  $\omega$  に相当する回転性のギャップが不可避免的に出現する。物体が変形の連続性を保った場合、これらのギャップ  $\omega$  は回位をもたらす。

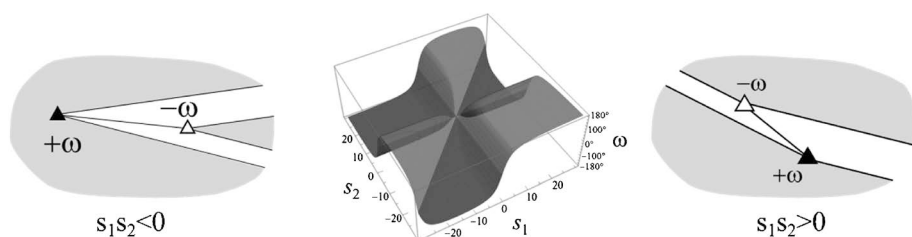


図 4 Ridge および Ortho キंकに生じる回位強度  $\omega$  の  $s_1, s_2$  依存性。

図中  $s_1 s_2 < 0$  の領域は Ridge キंकの回位強度、  $s_1 s_2 > 0$  の領域は Ortho キंकの回位強度を表す。  $\omega = 0$  となるのは  $s_1 = 0, s_2 = 0, s_1 = s_2$  のいずれかの場合であり、Ridge や Ortho キंकが単一のキंकバンドになった状態である。

的非線形性を考慮して初めて検知し正確に定量化できるものであり、歪みを線形近似して解析すると回位が存在しないかのように見える点には、注意が必要である。

すべり系が多数ある一般的な材料であれば、回位は局所的な塑性変形によって緩和されてしまうだろう。だが本解析はすべり系が1つしかない場合には回位の塑性緩和は不可能であることを明示している。したがって回位の存在はキंक組織の形態やその変形を考える際に本質的である。

#### (4) 弾性エネルギーゼロのキंक組織

熱力学的には、変形に伴って形成するキंक組織は、外力ポテンシャル、組織形成(変形)に伴う散逸エネルギー、キंक組織のもつ弾性エネルギーのバランスによって変分原理的に決定されると考えることができる。したがって、弾性エネルギーゼロの組織が存在しうのかという点は明確にしておく必要がある。キंक組織は互いに結合したキंकバンドの集合体である。前節で見た様にあらゆるキंकバンドの結合部には必然的に回位が発生する。後述するように回位は巨大な弾性エネルギーを持つので、キंक組織は回位による弾性エネルギーを低減するように形成するであろう。だが果たして弾性エネルギーをゼロにすることは可能であろうか？ここでは1例だけを示す。図5(a)はOrtho型結合によって形成される回位四重極子である。図5(b)のようにこの回位を打ち消す回位を先端を持ったキंकバンドが必ず存在する。したがって図5(c)のような交差キंकでは回位は対消滅しており弾性エネルギーはゼロになる。回位を対消滅させる組織の形態は他にも存在し、LeiとNakataniが示したように<sup>(11)</sup>、マトリクスがわずかにすべり変形することでも回位を消滅させることができる。この様に弾性エネルギーゼロのキंक組織は理論上存在する。キंक組織形成は回位を緩和・対消滅するように進行すると考えることは妥当に思われる。

#### (5) キंक組織形成による強化

上記の解析から明らかになったように、キंक同士は変形の連続性を保つように、また回位を小さくするように結合し

ていると考えられる。ひとたび形成されたキंक組織に外力を負荷し、高いシュミット因子をもつキंकバンド内ですべり変形が生じた場合、変形の連続性を保ち、なおかつ結合部の回位を大きくしないように、そのキंकバンドに結合しているキंकバンドは連携的に変形せざるを得ない。この連携変形は理論的には連結したキंकバンドすべてに及ぶ。ここで本質的に重要なのは、キंक変形が容易く生じる材料はそもそもすべり系が極めて限定的なもので、隣接キंकバンドに連携した変形が必ずしも外力に沿った変形とはなり得ない点である。ここが通常多結晶体とは大きく異なる点であり、著しい変形応力の上昇をもたらす一つの要因であると考えられる。このようにキंक組織には、すべり系が限定的であることに起因した強い幾何学的拘束をもたらす強化機構が、転位論的な強化機構と共存していると考えられる。また残存した回位と転位の相互作用も強化機構として働くだろう。最近の研究ではキंकバンドにすべりが交差すると新たに回位が生まれることも明らかになっている<sup>(12)</sup>。回位と転位の相互作用はキंक強化を論じる上で不可欠であり、次節で紹介する微分幾何学に基づく力学解析が重要になってくる。

### 3. 微分幾何学に基づくキंक変形の力学解析

#### (1) 格子欠陥の微分幾何

微分幾何学に基づく転位論はKondoにより提案された<sup>(13)</sup>。その後、Bilbyら<sup>(14)</sup>やKronerら<sup>(15)</sup>がこの考え方を支持し、YavariとGorielyが現代的な立場から転位の応力場を求めている<sup>(16)</sup>。近年、KobayashiとTarumiはKondo理論を数値計算に実装することで、自由境界を持つ連続体内部における転位の力学解析に成功した<sup>(17)(18)</sup>。キंक界面のミクロ組織は刃状転位列として表現できるため、この数値解析法を応用することで微分幾何学に基づいたキंक変形の解析が可能である。

#### (2) Riemann-Cartan 多様体上の弾塑性理論

Kondoにより提案された微分幾何学に基づく転位論は<sup>(13)</sup>、現代ではRiemann-Cartan多様体上の弾塑性理論と

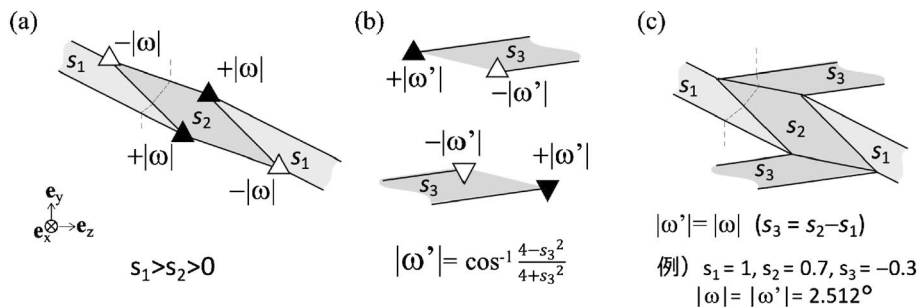


図5 交差キंकによる回位対消滅。

(a)に示す様な回位4重極子による屈曲したキंकバンドに、(b)に示すキंकバンドが連結した場合、任意の $s_1, s_2$ に対して $|\omega'| = |\omega|$ となる $s_3$ が必ず存在するので、(c)のように回位が対消滅した弾性エネルギーゼロの組織(交差キंक)の形成が可能である。



して理解することができる<sup>(16)</sup>。ここで Riemann–Cartan 多様体とは、Riemann 計量  $g$  と接続  $\nabla$  が備わった性質の良い多様体であり、接続に含まれる振率が転位を、曲率が回位を表している。この理論の中心的な考え方は、連続分布転位論における転位密度テンソルと、微分幾何学における振率形式の同値性にある。通常、連続体内部に存在する転位密度テンソル  $\alpha$  は次のように定義することができる。

$$\alpha = \left( f b^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \otimes (n^j \delta_{jk} dx^k)$$

ここで  $b$  は Burgers ベクトル、 $n$  は転位線の方向を表している。係数  $f$  は転位線の中心からの距離に依存した転位密度の分布関数である。一方、この二階テンソルの Hodge 双対は次のように表される。

$$\tau = * \alpha = (f b^i n^j \epsilon_{ijk}) dx^j \wedge dx^k \otimes \frac{\partial}{\partial x^i} = \tau^i \otimes \frac{\partial}{\partial x^i}$$

こうして定義された  $\tau$  が振率形式となる。Riemann–Cartan 多様体上の振率形式は、Cartan の第一構造方程式  $\tau^i = d\theta^i$  を満たすことから、これを積分することで双対枠  $\theta^i$  が得られ、転位の導入による塑性変形が数学的に決定される。こうして得られた塑性変形状態は、通常のユークリッド空間内には存在しないが、ここへ補足変形を加えることでユークリッド空間内へ埋め込むことができる。この補足変形が弾性変形である。ここで超弾性体の変分原理と St. Venant–Kirchhoff 型ひずみエネルギーを用いると、弾性変形は次のひずみエネルギー汎関数の最小点として特徴付けられる。

$$W(y) = \int_R \frac{1}{2} C^{ijkl} E_{ij} E_{kl} \det F_p \nu_R$$

ここで  $C$  は弾性係数テンソル、 $E$  は Green ひずみテンソルであり、次のように定義されている。

$$E_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{2} \left( \frac{\partial y^i}{\partial x^k} \frac{\partial y^j}{\partial x^l} - (F_p)_k^i (F_p)_l^j \right) dx^k \otimes dx^l$$

上式において、 $F_p$  は転位による塑性変形勾配を表しており、双対枠  $\theta^i$  から求めることができる。このエネルギー最小化問題をアイソジオメトリック解析へ実装する。これは、Galerkin 法を用いた弱形式解析の一種であり、基底関数に NURBS (Non-Uniform Rational B-Spline) を用いる点に最大の特徴がある。

### (3) 数値解析結果

ここでは二種類のキック変形モデルに対する解析結果を説明する。図 6 は解析に用いた転位の配置を示している。このうち (a) は、 $x_1$  軸と平行な Burgers ベクトルを持ち、転位線方向は  $x_2$  軸と平行な刃状転位列を表している。ここで、転位列は互いの距離 ( $x_2$  軸方向の間隔) が十分に小さいと考え、転位密度が薄い板面 (キック界面) に集中したモデルを考える。これを数値計算へ実装する際にはレベルセット関数を用いている。ここでは、正負の刃状転位列をモデルの中心から等距離の位置に導入しており、これによってキック特有の屈曲変形を発生させるとともに、屈曲角の向きを逆に取ることで、Ortho 型キックの変形形態を再現している。一方、

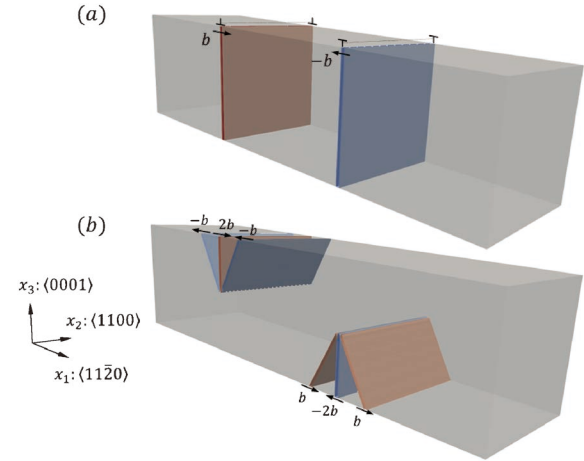


図 6 Ortho 型キックおよび Ridge 型キックの転位モデル。いずれのモデルも Burgers ベクトルは  $x_1$  軸と平行、転位線方向は  $x_2$  軸と平行な刃状転位より構成されており、転位密度分布はレベルセット関数を用いて表現している。(オンラインカラー)

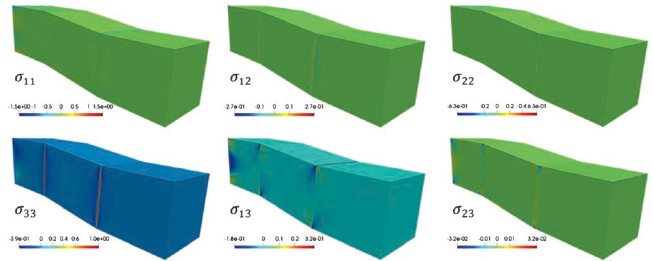


図 7 アイソジオメトリック解析により得られた Ortho 型キックの巨視的変形と Piola–Kirchhoff の第二応力の分布。転位密度の集中するキック界面ではキック変形に特有の屈曲変形が認められるものの、キック界面での応力集中は比較的小さい。(オンラインカラー)

(b) は Ridge 型キックの解析モデルを表している。Ridge 型の解析もレベルセット関数を用いて転位列を表現することで進めているが、ここでは Ridge の中心部に側面の 2 倍の Burgers ベクトルを持つ転位列を配置することが特徴である。

Ortho 型キックモデルに対して行った応力場の解析結果を図 7 に示す。これより明らかなように、転位列を用いて表現したキック界面では明瞭な屈曲変形が認められる。この転位列を傾角粒界と考えると、理論的に予想される粒界方位差とキック変形の屈曲角は一致することから、本研究によるモデル化は適切に行われたものと考えられる。次に、キック変形による内部応力場について考察する。本研究におけるレベルセット関数を用いた転位列のモデリングでは、キック界面を構成する転位列は互いの距離が十分に小さいことから、個々の転位による応力場は互いに打ち消し合って消滅している。そのため、図 2 の応力場はキックの幾何形態に起因して生じるものである。解析の結果、 $\sigma_{33}$  および  $\sigma_{13}$  はキック界面に沿ってわずかに発生するものの、他の応力はほぼ発生しないことが確認される。

## 文 献

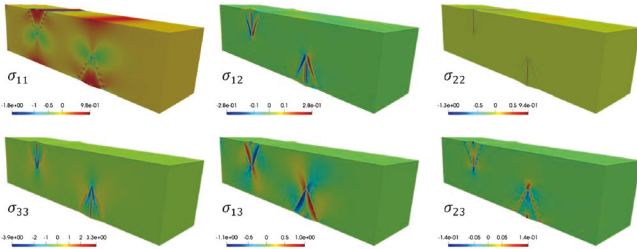


図8 アイソジオメトリック解析により得られた Ridge 型キンの巨視的変形と Piola-Kirchhoff の第二応力の分布. 転位密度の集中するキンク界面ではキンク変形に特有の屈曲変形が認められるものの、キンク界面での応力集中は比較的小さい。(オンラインカラー)

同様の解析を Ridge 型キンクモデルに対して行った結果を図8に示す。まず変形形態に着目すると、Ridge 型特有のくさび型形状が現れており、転位モデルによって何れのキンク形態も再現できることが確認される。一方、内部応力場に着目すると、Ortho 型キンクと比較してキンク界面に沿って高い応力集中が生じており、とりわけ Ridge の先端での応力集中が顕著である。この結果は、Ridge 先端における回位の形成を力学的に裏付けている。Ridge 型キンクが持つ高い内部応力は、後続の転位運動に対して大きな移動障壁となることから、回位に起因した新しい材料強化機構になることが示唆される。

## 4. 結 言

以上の様に、変形の連続性というプリミティブな原理に基づきキンクバンドの幾何を正確に捉えると、すべり系が1つに限定された系では、キンクバンドの結合部には必ず回位が発生することが明らかになった。キンク組織形成には回位が隠然と関与していることを示唆する実験結果も得られつつある<sup>(19)</sup>。

実験で観察されるキンク強化は、回位や幾何学的拘束だけでなく従来の転位論的な強化量も重畳していると考えられ、これらの寄与を識別するためには回位による強化量を精密に見積もる必要がある。微分幾何学に基づく転位論を応用した連続体力学解析は、回位の応力場だけでなくフランクベクトルの同定も精密に行えることが明らかになりつつあり、キンク強化理論を構築する上で今後欠かせない解析方法になると期待される。

本研究は新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」(JP18H05481)の支援による。

- (1) K. Hagihara, A. Kinoshita, Y. Sugino, M. Yamasaki, Y. Kawamura, H.Y. Yasuda and Y. Umakoshi: Intermetallics, **18** (2010), 1079–1085.
- (2) J.B. Hess and C.S. Barrett: Metals Transactions, **185**(1949), 599–606.
- (3) T. Matsumoto, M. Yamasaki, K. Hagihara and Y. Kawamura: Acta Mater., **151**(2018), 112–124.
- (4) E. Orowan: Nature, **149**(1942), 643–644.
- (5) 河村能人：あたりあ, **54**(2015), 44–49.
- (6) K. Hagihara, Z. Li, M. Yamasaki, Y. Kawamura and T. Nakano: Acta Materialia, **163**(2019), 226–239.
- (7) J.J. Gilman: J. Metals, **6**(1954), 621–629.
- (8) J.M. Ball and R.D. James: Archive for Rational Mechanics and Analysis, **100**(1987), 13–52.
- (9) T. Inamura: Acta Materialia, **173**(2019), 270–280.
- (10) A.E. Romanov and V.I. Vladimirov: Disclinations in Crystalline Solids, North-Holland, Amsterdam, (1992).
- (11) X.-W. Lei and A. Nakatani: J. Applied Mechanics, **82**(2015), 0710161–0710166.
- (12) 稲邑朋也：ミルフィーユ構造の材料科学 令和3年度研究会予稿集, (2022), 75–76.
- (13) K. Kondo: RAAG memoirs the unifying study of basic problems in engineering and physical sciences by means of geometry, **1**(1995), 6–17.
- (14) A. Bilby, R. Bullough and E. Smith: Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, **231**(1995), 263–273.
- (15) E. Kroner and A. Seeger: Archive for Rational Mechanics and Analysis, **3**(1959), 97–119.
- (16) A. Yavari and A. Goriely: Archive for Rational Mechanics and Analysis, **205**(2012), 59–118.
- (17) 小林舜典, 垂水竜一：日本機械学会論文集, **87**(2021), 20–00409.
- (18) 小林舜典, 垂水竜一：日本機械学会論文集, **87**(2021), 21–00031.
- (19) S. Yamasaki, T. Tokuzumi, W. Li, M. Mitsuhara, K. Hagihara, T. Fujii and H. Nakashima: Acta Mater., **195**(2020), 25–34.

★★

稲邑朋也  
2003年 東京工業大学総合理工学研究科材料物理科学専攻博士課程終了(博士(工学), 2003年東京工業大学)。

主な略歴 2003年 東京工業大学精密工学研究所助手  
2010年 東京工業大学精密工学研究所准教授  
2018年4月- 現職

専門分野：金属組織学，形状記憶合金，マルテンサイト変態  
◎変形の幾何に基づく相変態組織，変形組織の解析と材料設計に関する研究に従事。

★★



稲邑朋也

垂水竜一

# ミルフィーユ構造を有する 高密度ポリエチレン結晶の高強度化メカニズム

齋藤 拓\*

## 1. はじめに

高密度ポリエチレン(HDPE: high density polyethylene)は密度が0.942以上のポリエチレンで、密度が0.910~0.930の低密度ポリエチレンに比べて硬く、ガソリントank, ドラム缶, 水道・ガスパイプ, ケース, レジ袋などに利用されている結晶性の高分子である。一般にHDPEのような結晶性高分子を高強度化させるためには結晶の度合い(結晶化度)を高くさせる, あるいは高配向させることが考えられている。それに対して, マグネシウム合金において硬質層と軟質層から成るミルフィーユ構造にキंकを導入することで高強度化されるという高分子の分野では考えられていなかった概念での高強度化が見出されている<sup>(1)</sup>。最近, HDPEにおいてサイズがナノメートル次元のミルフィーユ構造を形成させることができ, それを熱延伸することで高強度化できることが見出された<sup>(2)</sup>。本報では高分子の結晶構造について概説して, HDPEにおけるミルフィーユ構造の形成, 力学挙動とその発現メカニズムについて述べる。

## 2. 高分子の結晶の高次構造

高分子は構造単位(HDPEであればエチレン-CH<sub>2</sub>-)が数千個つながった分子鎖とよばれる長い鎖状の分子から成る。HDPEのような結晶性高分子を熔融状態から融解温度以下に冷却すると, 分子鎖は折り畳みを伴い規則正しく配列しながら結晶化して, 厚みが数nm~数十nmのラメラとよばれる板状の結晶が形成される(図1)。一般に高分子では100%結晶化することはなく, ラメラの間に非晶領域が存在して, ラメラと非晶領域は交互に積層されている。HDPEでは非

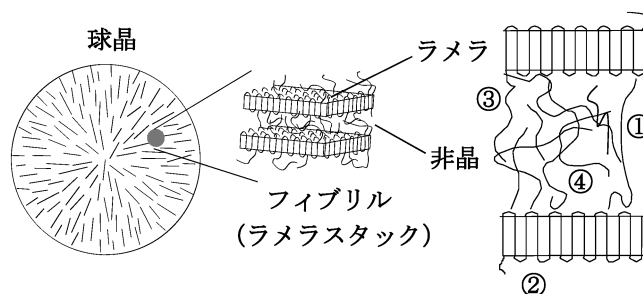


図1 高分子の結晶構造の模式図。

晶領域が30~50%存在して, 非晶領域は①隣り合う結晶を連結する分子鎖(タイ分子), ②結晶表面付近で折り畳まれた分子鎖, ③一方の結晶のみにつながっている分子鎖, ④結晶に拘束されない分子鎖から成る。①のタイ分子はラメラ間の力の伝達を担うため, 高分子結晶の力学的性質に大きく寄与すると考えられている<sup>(3)</sup>。延伸などの外場を印加しないで結晶化させると, 結晶が中心から放射状に成長して球晶とよばれる直径が数 $\mu\text{m}$ ~数百 $\mu\text{m}$ の球状の結晶が形成される。

## 3. ミルフィーユ構造の形成と力学特性

高密度ポリエチレン(HDPE)の結晶層のラメラは硬いのに対して非晶層は室温でガラス転移温度以上にあるために軟らかい。ラメラと非晶層は交互に積層されているため, 図1に示した未配向の球晶においても局所的には硬質層と軟質層から成るミルフィーユ構造が形成されている。熔融状態から成形加工機を用いてダイとよばれる吐出口から押し出して配向しながら結晶化させると巨視的にミルフィーユ構造を形成させることができる。配向して得られた配向HDPEでは2

\* 東京農工大学工学府; 教授(〒184-8588 東京都小金井市中町 2-24-16)  
Strengthening Mechanism of Heat Elongated Mille-feuille Structured High-Density Polyethylene Crystallites; Hiromu Saito(Tokyo University of Agriculture and Technology, Tokyo)  
Keywords: high-density polyethylene, polymer, mille-feuille structure, crystallization, small-angle x-ray scattering, strengthening  
2022年5月2日受理[doi:10.2320/materia.61.569]



点スポット状の小角 X 線散乱 (SAXS: small angle e-ray scattering) 像が現れることから、長いラメラから成り、ラメラの長軸方向が配向方向 EX に対して垂直で長周期がおよそ 20 nm のミルフィーユ構造が形成されることがわかった(図 2(a))<sup>(2)</sup>。

図 1 に示した球晶が形成されている未配向 HDPE と図 2 (a) に示した巨視的にミルフィーユ構造が形成されている配向 HDPE の応力-ひずみ曲線を図 3 に示す。ここで伸長方向 SD はラメラの長軸方向に対して垂直方向である。巨視的なミルフィーユ構造が形成された配向 HDPE では未配向 HDPE に対して降伏応力は増加したが、破断強度は増加せず、大きな高強度化は見られなかった。配向 HDPE をラメラの長軸方向に対して垂直方向に伸長すると、降伏時に強い楕円状の SAXS 像が現れ(図 2(b)), 伸長に伴いストリーク状の SAXS 像へと変化することから(図 2(c)), 降伏時においてラメラが破壊されてポイドが形成され、伸長に伴いラメラが繊維状の構造へと変化してフィブリル化することが示唆された。配向 HDPE では長いラメラから成るミルフィーユ構造が形成されたが、長いラメラが伸長により低い降伏応力で破壊されたことでポイドが形成され、さらにフィブリル化

して分子鎖が配向しても隣の分子鎖同士が滑るために大きな高強度化は見られなかったと考えられる<sup>(2)</sup>。また、ラメラ間非晶領域の分子鎖の数密度を低下させると、伸長によるラメラの変形が生じやすくなることで降伏点応力が低下して、厚いラメラが不均一に大きikutawみ、その近傍で大きなポイドが形成されることで強度が著しく低下してしまう<sup>(3)</sup>。

#### 4. ミルフィーユ構造の秩序化による高強度化

配向 HDPE を熱延伸すると図 2(a) で示された長いラメラが短いラメラへと変化することが、スポット状から層状への SAXS 像の変化から明らかにされた(図 4)。ここで延伸方向 ED はラメラの長軸方向に対して垂直方向である。延伸倍率  $\lambda$  が増加しても層状の SAXS 像は保持され、 $\lambda$  の増加に伴い散乱プロファイルが鋭くなり、散乱強度が増加することから、 $\lambda$  の増加に伴いミルフィーユ構造を保持したままラメラの配列の秩序性が増加することが示唆された<sup>(2)</sup>。

図 4 に示した熱延伸 HDPE の応力-ひずみ曲線を図 5 に示す。ここで伸長方向は EX と ED に平行方向、ラメラの長軸方向に対して垂直方向である。熱延伸倍率  $\lambda$  の増加に伴い降伏点強度が増加して  $\lambda > 300\%$  で降伏点が見えなくなり、400% 熱延伸することで破断強度が 170 MPa となり配向 HDPE の約 5 倍に増加した。これらの結果から HDPE を熱延伸してミルフィーユ構造を秩序化することで大きく高強度化することが見出された。 $\lambda > 200\%$  の熱延伸 HDPE では引張試験後においても層状の SAXS 像が観察されることからミルフィーユ構造が保持されることが、また配向 HDPE を伸長することで現れた楕円状やストリーク状の強い SAXS 像が見えなかったことからポイドの形成やフィブリル化が抑

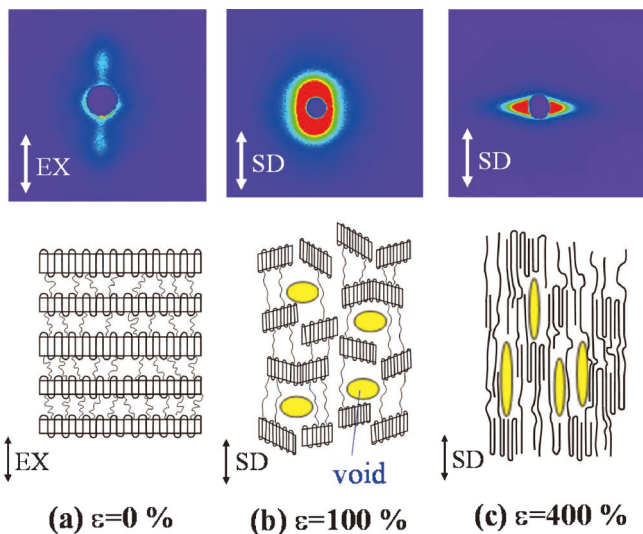


図 2 配向 HDPE とその伸長過程における SAXS 像と構造の模式図。

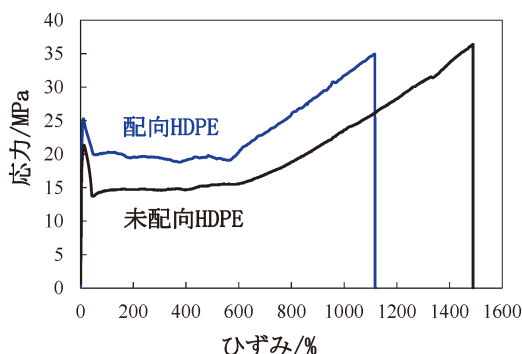


図 3 未配向 HDPE と配向 HDPE の応力-ひずみ曲線。

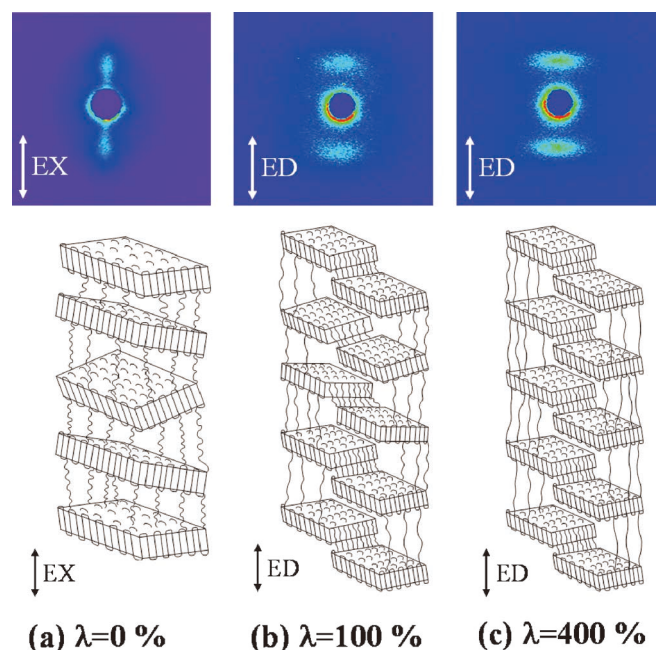


図 4 配向 HDPE と熱延伸 HDPE の SAXS 像と構造の模式図。



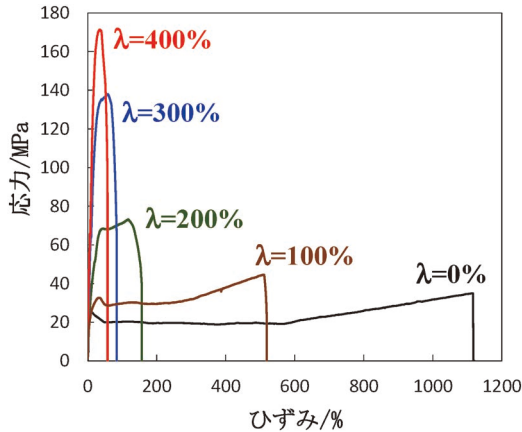


図5 配向 HDPE と熱延伸 HDPE の応力-ひずみ曲線.

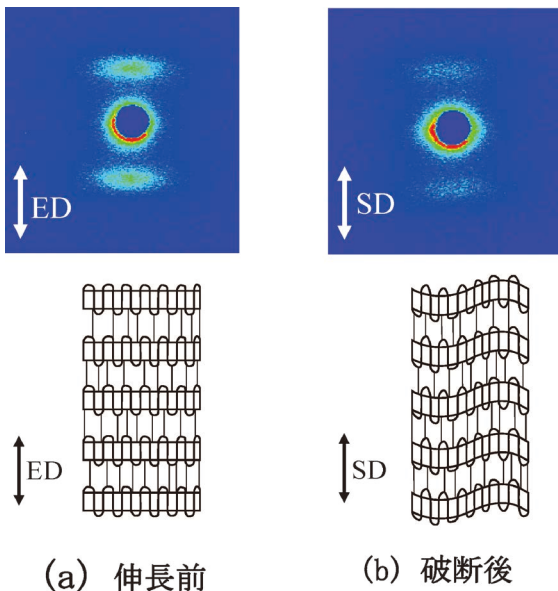


図6 熱延伸 HDPE ( $\lambda=400\%$ ) の伸長過程における SAXS 像と構造の模式図.

制されることがわかった(図6). さらに, 伸長により SAXS 像が散漫になることから, ラメラが伸長により緩やかに湾曲することが示唆された. 高 $\lambda$ の熱延伸 HDPE では硬質層が軟質層中の伸ばされたタイ分子により結ばれて規則正しく配列したミルフィーユ構造が形成され, 伸長しても結晶中の分子鎖間での滑りが生じず, 硬質層が破壊されないためにラメラの破壊やボイドの形成による降伏が抑制され, 高強度化したと考えられる. また, 伸長中に座屈しない緩やかなキック構造が形成されたことでラメラの破壊が抑制されて降伏応力が増大したと考えられる. 広角 X 線回折の結果から $\lambda$ の増加に伴い熱延伸 HDPE の結晶鎖の配向度は高くなったが,

高強度化しなかった配向 HDPE の高ひずみにおける配向度よりも低かった. また, DSC 測定の結果から $\lambda$ の増加に伴う結晶化度の増加が見られなかった<sup>(2)</sup>. このようなミルフィーユ構造を利用した結晶性高分子の高強度化は, 高分子の分野で考えられていた高結晶化度あるいは高配向度による高強度化とは異なる.

## 5. おわりに

高密度ポリエチレン(HDPE)を熱延伸して短いラメラか成る秩序性の高いミルフィーユ構造を形成させることで, 伸長時の降伏が抑制されて高強度化することがわかった. ミルフィーユ構造形成による高強度化は HDPE に特異なものではなく, ポリプロピレンやポリフッ化ビニリデンのような結晶性高分子においても見出されている. またゴム材料として知られているポリウレタンを熱延伸することで硬いハードセグメント層と軟らかいソフトセグメント層から成るミルフィーユ構造を形成させて, さらにハードセグメント層を伸長しても破壊されないように強固にさせることで, 変形回復性を損なうことなく破断応力が 130 MPa を超える高強度ゴム材料を得ることができた<sup>(4)</sup>. 以上のようにマグネシウム合金において提案されたミルフィーユ構造の概念をポリマーに適用することで高強度化できることが明らかになった.

キック状のラメラ構造を形成させると伸長によりラメラが折れ曲がりボイドが形成されやすくなるため高強度化の度合いが小さくなることが超臨界二酸化炭素下で得られた熱延伸 HDPE の結果から示されており, 結晶性高分子の高強度化には座屈の抑制が必要であると考えられる.

## 文 献

- (1) Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue and T. Masumoto: Mater. Trans., **42**(2001), 1172-1176.
- (2) T. Murayama, E. Abe and H. Saito: Polymer, **236**(2021), 124343.
- (3) M. Fukuoka, T. Aya, H. Saito, S. Ichihara and H. Sano: Polym. J., **38**(2006), 542-547.
- (4) M. Takano, K. Takamatsu and H. Saito: Polymers, **14**(2022), 1470.



斎藤 拓

★★  
 1987年 3月 東京工業大学修士課程有機材料工学専攻 修了  
 1987年 6月 東京工業大学工学部有機材料工学科助手  
 1999年 9月 東京農工大学工学部助教授  
 2008年 4月- 現職  
 専門分野: 高分子物性  
 ◎結晶性高分子やゴム材料を対象にポリマーブレンドや高次構造制御による高性能ポリマー材料の設計に従事.  
 ★★★

# MAX 相セラミックス $Ti_3SiC_2$ 焼結体における キンク変形とキンク強化の可能性について

池田 賢一\*

## 1. はじめに

MAX 相は、 $M_{n+1}AX_n$  ( $n=1\sim 3$ ) の一般式で示される三元化合物の総称であり、M は Ti, Cr, Zr, Nb などの遷移金属元素、A は Si, Al, Ge などの A グループ元素、X は C もしくは N である<sup>(1)-(3)</sup>。MAX 相は六方晶系の結晶構造を有し、結晶を構成する  $M_{n+1}X_n$  層と A 層が c 軸方向に積層するような層状構造を持つため、強い異方性を示すことが知られている。 $M_{n+1}X_n$  層と A 層がそれぞれ共有結合と金属結合を有することに起因して、セラミックス的性質と金属的性質を兼ね備えたユニークな材料<sup>(4)-(6)</sup>としても注目されている。MAX 相のように結合の強さが異なる層が交互に積層された構造をミルフィーユ構造<sup>(7)</sup>と呼び、ユニットセルが原子レベルの硬質層と軟質層で構成されるため、長周期積層規則 (Long-Period Stacking Ordered: LPSO) 構造を有する Mg 系合金と同様に、結晶構造型ミルフィーユ構造に分類することができる。セラミックスに分類される MAX 相でも LPSO 相と同様にキンク変形が生じること<sup>(1)-(3)</sup>が知られており、グラファイト<sup>(8)</sup>や雲母<sup>(9)</sup>などでも同様にその形成過程についての研究がなされてきた。セラミックスにおけるキンク変形は、主に層状物質で生じることが知られており、キンク変形した結晶粒の形態は LPSO 相と同様であるが、層間の結合力の違いから、層間剥離 (デラミネーション) が伴うことに違いがある。このため、層状化合物のキンク強化についてはほとんど議論されていないのが現状である。

そこで本報では、著者らが MAX 相セラミックスの一種である  $Ti_3SiC_2$  焼結体を用いて行った力学特性の方位依存性とキンク変形、キンク境界の特徴を評価した内容を紹介します。

MAX 相セラミックスにおけるキンク強化の可能性について述べる。

## 2. $Ti_3SiC_2$ 配向焼結体の力学特性の方位依存性

結晶性材料の力学特性の方位依存性を評価する場合は、単結晶を用いた研究が有効である。単結晶を作製することが困難な金属材料の場合は、加工熱処理や一方向凝固等によって、特定の結晶方位を配向させた結晶の集合体、いわゆる集合組織を有する多結晶体を用いた研究が行われる。MAX 相セラミックスの場合も、単結晶を作製することが困難であるため、特定の結晶方位が揃った (配向した) 結晶粒で構成される多結晶体を用いることが有効である。以降、本報ではこのような特徴を有する多結晶体のことを配向成形体や配向焼結体のように呼称する。近年、セラミックスの結晶配向制御技術が多く提案されているが、本研究では、その中でもコロイドプロセスを用いた結晶配向制御技術である磁場中スリップキャストに注目した。これは、結晶異方性を有する物質の粉末を分散したスラリーに対してスリップキャストする過程で強力な磁場を印加することにより配向成形体を作製する手法である。 $Ti_3SiC_2$  に対しても本手法による配向焼結体の作製が報告されている<sup>(10)-(12)</sup>。図 1 は、磁場中スリップキャストの模式図と得られた成形体から放電プラズマ焼結 (Spark Plasma Sintering: SPS) によって作製した  $Ti_3SiC_2$  配向焼結体の結晶方位分布と 0001 正極点図である。 $Ti_3SiC_2$  の場合はスリップキャスト時に回転磁場を印加することでスリップキャスト方向に結晶の c 軸が配向することが明らかにされており、実際に図 1 (b) と (c) に示すように強い結晶配向組織が形成される。このような配向焼結体について荷重荷方向と c

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

Kink Deformation and The Possibility of Kink Strengthening in  $Ti_3SiC_2$  MAX Phase Ceramics; Ken-ichi Ikeda (Division of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo)

Keywords: MAX phase, kink deformation, kink strengthening, textured  $Ti_3SiC_2$  sintered body, high magnetic field, electron backscattered diffraction

2022年5月30日受理 [doi:10.2320/materia.61.572]

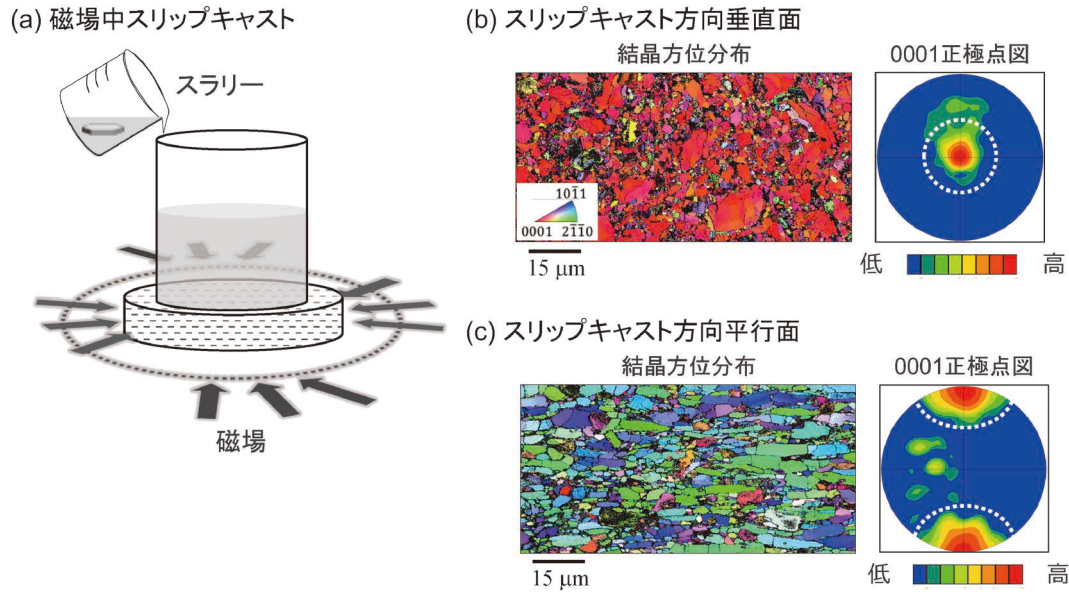


図1 (a)磁場中スリップキャストの模式図, (b), (c)スリップキャスト後にSPSによる焼結を行った  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  配向焼結体の結晶方位分布と0001正極点図. (b)スリップキャスト方向垂直面, (c)スリップキャスト方向平行面.

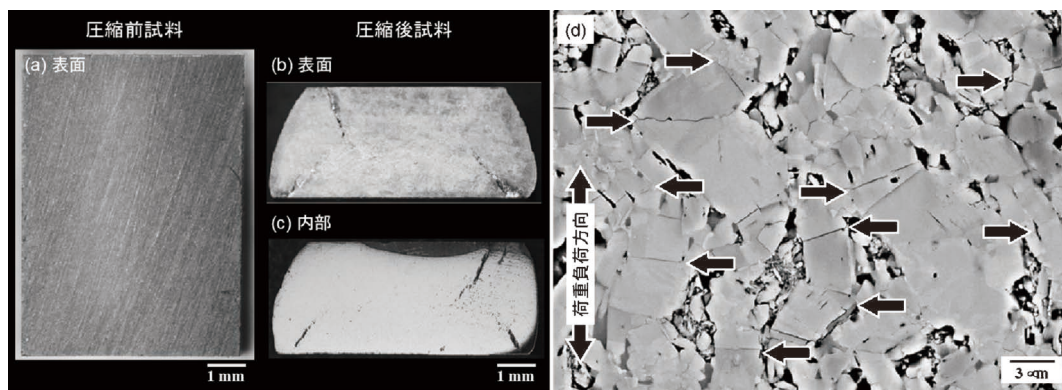


図2  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  配向焼結体を1200°Cで高温圧縮した試料の(a)-(c)試験前後の光学顕微鏡像と(d)反射電子像.

軸とのなす角度が0°, 45°および90°になるような試験片を作製し, ビッカース硬さの荷重依存性を評価した. その結果, 全ての試料において, 10 N以下の低荷重では, 荷重が低いほどビッカース硬さの値が大きくなり, 10 N以上ではほぼ一定の値となる傾向を示した. また, どの荷重においても0°試料が90°試料よりも約2 GPa, 45°試料よりも約3.5 GPa高い値を示すことが明らかになった. 試験後の圧痕近傍の表面観察を行うと90°試料において顕著にキンクが形成していることが確認できた<sup>(13)</sup>. さらに著者らは,  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  配向焼結体を高温環境下で圧縮することでキンク変形が生じるか否かについても調査した. その結果, 90°試料をSPS装置内で1200°C, 真空環境下で圧縮荷重を施すと図2(a)-(c)に示すように大きく塑性変形することがわかった. 内部の変形組織を観察すると図2(d)の矢印で示すように多くの結晶粒にキンク変形が生じていることを確認した. このように  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  配向焼結体を用いることで, 高温環境でキンク境界を意図的に導入することができ, MAX相セラミックスのキ

ンク変形機構の解明やキンク強化の可能性について議論することが可能であることが示唆された.

### 3. $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$ 焼結体中に形成されるキンク境界の特徴

これまでの研究で, Mg-TM-RE(TM: 遷移金属, RE: 希土類元素)合金中のLPSO構造相内に導入されるキンク境界には, 結晶学的な特徴を有することが報告されており, 共通回転軸や回転角等の特徴について明らかにされてきた<sup>(14)</sup>. そこで著者らは,  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  焼結体に導入されるキンク境界の結晶学的な特徴を評価するために電子線後方散乱回折(Electron Back Scattered Diffraction: EBSD)法を用いた解析を行い, LPSO相のキンク境界の特徴と比較した. ここで, キンク境界の解析に用いた試料は, 周りの結晶粒からの拘束を弱め, キンク導入を促進するために意図的に気孔を導入した配向ポーラス焼結体<sup>(15)(16)</sup>を用いた. 配向ポーラス焼結体を作製するために, スラリーには  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  粉末とポリメ



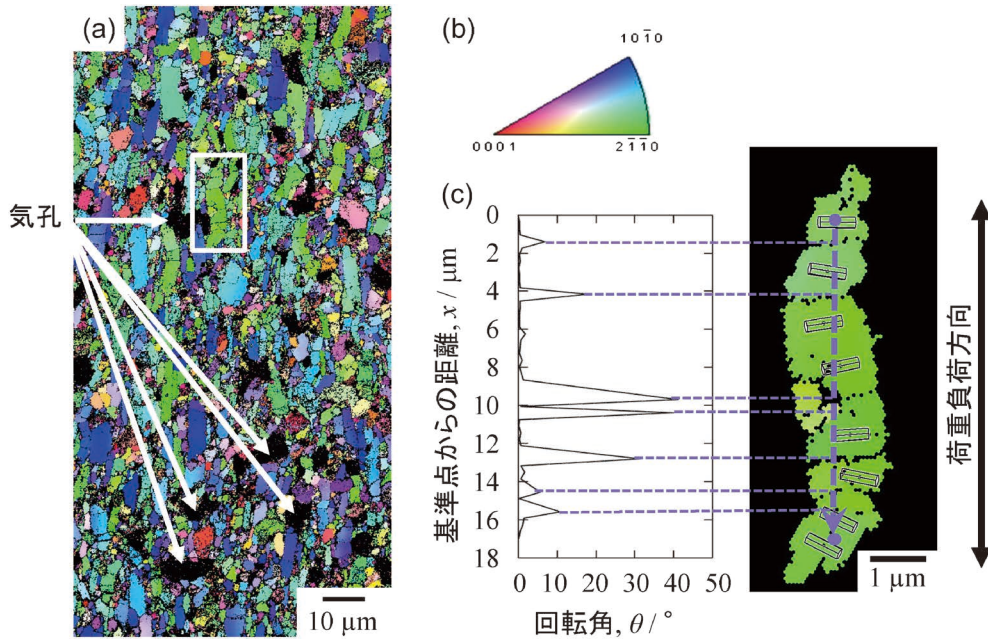


図3  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  配向ポーラス焼結体を $1200^\circ\text{C}$ で高温圧縮した試料の(a)変形後の結晶方位分布図(b)で示したカラーキーに従い、測定面法線方向の結晶方位を示している。(c)キック変形が生じた結晶粒の解析線における回転軸分布。論文(15)(16)から変更して引用。

タクリル酸メチル(polymethyl methacrylate: PMMA)粒子を混合させた。PMMAはスペーサーとして入れており、SPSによる焼結の際に焼結温度よりも低い温度で保持して焼き飛ばすことで、焼結体に意図的に気孔を導入する役割を持つ。得られた配向ポーラス焼結体から $90^\circ$ 試料を作製し、SPS装置内で $1200^\circ\text{C}$ 、真空環境下で圧縮負荷を施した。図3(a)は、高温圧縮負荷を施した配向ポーラス焼結体の荷重負荷方向と平行な面を測定面とした結晶方位分布図である。図3(b)の標準ステレオ三角形のカラーキーに従い、測定面法線方向の結晶方位を示している。図3(a)中の白矢印で示すようにPMMAに起因した気孔が導入されていること、ほぼ全ての結晶粒が(0001)面と垂直方向の面が測定面に現れていることから、本手法により配向ポーラス焼結体の作製が可能であることが示された。また、図3(a)の白四角で囲んだ結晶粒の拡大像である図3(c)で示すように結晶のc軸に垂直方向からの圧縮によって多くの結晶粒がキック変形していることが明らかになった。図中の上下方向の矢印で示す点線上の測定点間の回転角の変化を左のグラフに示した。同一結晶粒内に複数の回転角のピークが確認できる。結晶方位分布図との対応からこのピーク位置がキック境界であると判断した。複数の結晶粒内のキック境界の共通回転軸と回転角を評価した結果、共通回転軸はc軸と垂直な方位を有していること、回転角は図3(c)にも示しているように様々な角度を有することが明らかになった。これは、Mg-TM-RE合金中のLPSO相内に導入される主なキック境界の特徴と一致しており、六方晶系の結晶構造を有するミルフィーユ物質のキック境界の共通の特徴であると言える。

#### 4. おわりに～キック強化の可能性について～

おわりにMAX相セラミックスにおけるキック強化の可能性について述べる。松井らは、 $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$ ランダム焼結体に高温圧縮クリープ試験で導入されたキック境界近傍に、ナノインデンテーションによる力学特性評価を行い、圧子圧入により形成した底面すべり線がキック境界で止められていることを示した<sup>(17)</sup>。この結果は、高温で導入されたキックが室温での塑性変形の抵抗、すなわち強化に寄与することを示唆するものである。

導入されたキック境界がその後の塑性変形の抵抗になりうるのかを定量的に評価するためには、結晶配向させた試料を用いることが有効である。Hagiharaらは、Mg-Zn-Y合金の一方向凝固材を用いてキックを導入した後、これらが底面すべりの活動の抵抗になりうるのかを検証し、キック強化量の定量的な評価を行った<sup>(18)</sup>。本報で紹介した配向焼結体を用いることができれば、MAX相セラミックスのキック強化についての議論を進めることが可能である。しかし、MAX相セラミックスのような層状物質におけるキック変形には、最初にも述べたようにデラミネーションを伴う場合が多い。キック強化量を単独で評価するためには、デラミネーションを考慮に入れた評価を行わないといけない。そこで、配向焼結体と配向ポーラス焼結体を用いることが、キック強化量を評価するのに有効であると考え、現在、評価を進めているところである。

本報では、MAX相セラミックスを対象としたキック変形の特徴について紹介した。キック変形については、多くの研





# Ti 基合金におけるミルフィーユ構造の形成と キンク帯導入への展開

江村 聡\*

## 1. はじめに

筆者は科研費新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」において、Mg 合金等で見いだされている「キンク強化」を Ti 系合金に展開することを目的とした研究を行っている。本稿では、Ti-Mo、Ti-Cr など Ti 系合金にミルフィーユ構造、さらにはキンク状の変形組織を導入した研究について紹介する<sup>(1)(2)</sup>。

## 2. Ti 系合金へのミルフィーユ構造の導入

Ti 系合金において、経験的ミルフィーユ条件(1. 硬質層と軟質層からなる層状構造であること, 2. 層間距離がサブミクロン程度以下であること, 3. 結晶の容易すべり系が層面に限定されていること, 4. キンク形成時において層間剥離を起こさないこと)のすべてを一度に満たすミルフィーユ構造を実現するのは難しいと考えられる。そこで、まずは六方最密構造(hcp)の $\alpha$ 相を硬質層、体心立方構造(bcc)の $\beta$ 相を軟質層と考え、この二相によってなるべくサブミクロン程度に近いところまで層間距離を小さくしたミルフィーユ構造を実現することを目指した<sup>(1)</sup>。

「はじめに」で述べたように、対象とする Ti 系材料として、Ti-Mo、Ti-Cr といった二元系の $\beta$ 型チタン合金( $\beta$ 相を主相とし、熱処理によって $\alpha$ 相が析出する合金)を選択した。本二元系合金では $\alpha$ 相を固溶強化する Al のような元素を含まないため、すべり系の少ない $\alpha$ 相の強度を下げ、通常 $\beta$ 相が主に担うであろう変形を $\alpha$ 相にも担わせることで、キンク変形が生じやすくなることを期待したためである。

物質・材料研究機構の超清浄浮揚溶解炉(CCLM)にて溶

製した Ti-12 mass%Mo (以下 mass% を省略) 合金および Ti-9Cr 合金のインゴット(重量約 1 kg)に熱間鍛造、熱間圧延(一部はさらに冷間圧延)を施し、1 mm 厚ないし 6 mm 厚の板材を作製した。板材を 10 mm 程度の幅に切断後 Ar 雰囲気中で 1173 K、18 ks の溶体化処理を施し、粒径数百  $\mu\text{m}$  の粗大な $\beta$ 単相材を得た。この $\beta$ 単相材にこれまでの圧延方向と垂直な方向に 5% 程度の冷間軽圧延を加え、さらに $\alpha$ 相の析出する温度領域で最大 180 ks の時効処理を加えた。

図 1 は 5% の冷間軽圧延を加えた 1 mm 厚の Ti-12Mo 合金板材を TD 方向(圧延材の側面)から観察した光学顕微鏡写真である。直線状に見えるコントラストは $\{332\}\langle 113\rangle$ 双晶と呼ばれる $\beta$ 型チタン合金に広く見られる変形双晶であり、冷間軽圧延時に導入されたものである。図 2 はこの軽圧延材を 973 K で 180 ks 時効処理し $\alpha$ 相を析出させた試料を TD 方向から走査型電子顕微鏡(SEM)の反射電子像(BEI 像)によって観察したものである。SEM 観察によって明る

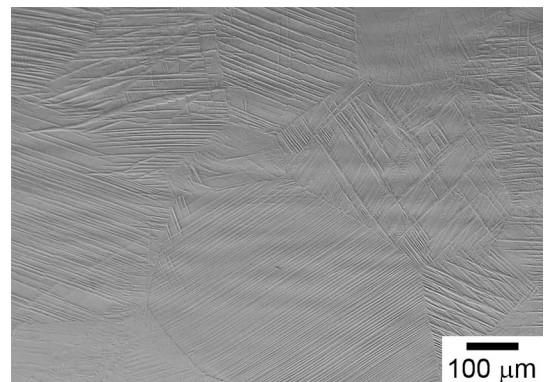


図 1 5%冷間軽圧延を加えた Ti-12Mo 合金の光学顕微鏡写真(TD 面)<sup>(1)</sup>。

\* 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点; 主幹研究員(〒305-0047 つくば市千現 1-2-1)

Formation of Millefeuille Structure in Titanium-based Alloys and its Development to the Introduction of Kink Bands; Satoshi Emura (Research Center for Structural Materials, National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba)

Keywords: beta titanium alloys, hcp phase, bcc phase, cold rolling, aging, twin, compression tests

2022年4月19日受理[doi:10.2320/materia.61.576]

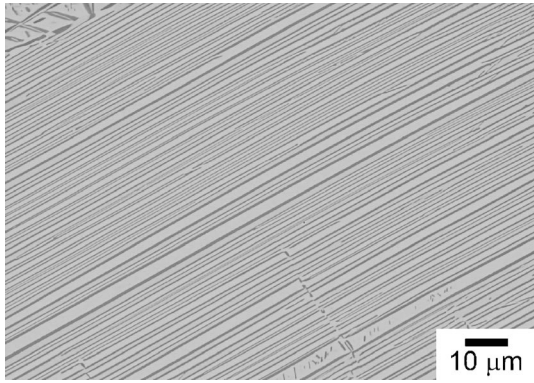


図2 5%冷間軽圧延後973 K, 180 ksの時効処理を施したTi-12Mo合金のSEM写真(TD面)<sup>(1)</sup>.

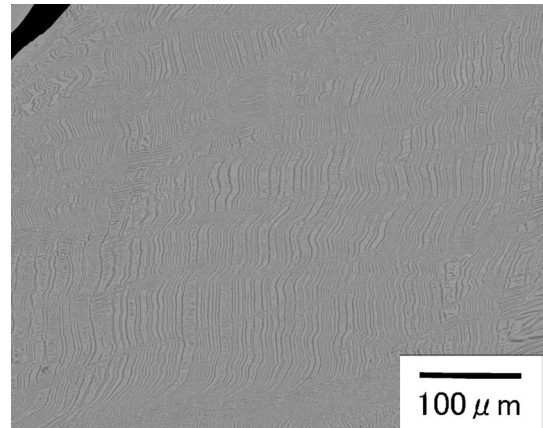


図3 573 Kで50%まで圧縮変形を加えたTi-9Cr合金ミルフィーユ材の断面SEM写真(上下方向が圧縮方向)<sup>(2)</sup>.

く見える $\beta$ 相と暗く見える $\alpha$ 相が交互に重なっているのがわかる。この $\alpha$ 相は、冷間軽圧延によって導入された変形双晶の界面に優先的に析出したものである。集束イオンビーム(FIB)とSEMを組み合わせた三次元観察によって、この $\alpha$ 相と $\beta$ 相は三次元的に積層したミルフィーユ構造を形成していることがわかっている。

同様の手法を用いることで、6 mm厚のTi-9Cr合金板材においても $\alpha/\beta$ 二相からなる層状ミルフィーユ構造が得られている<sup>(3)</sup>。

### 3. Ti系合金へのキック変形の導入

得られたミルフィーユ構造に圧縮変形や圧延を加えることでキック変形の導入を試みている。室温での圧縮変形挙動やキック変形の導入については他で報告している<sup>(4)(5)</sup>。ここでは中温域での圧縮変形によってキックの導入を試みた結果を紹介する<sup>(2)</sup>。

5%の冷間軽圧延および923 K, 180 ksの時効処理によって $\alpha/\beta$ のミルフィーユ構造を導入した6 mm厚のTi-9Cr合金板材から冷間軽圧延時のTD方向が圧縮方向となるように直径5 mm, 高さ7.5 mmの円柱試験片を採取し、473 Kから673 Kの温度範囲で最大50%の圧縮試験(ひずみ速度0.1/s)を真空中で行った。

図3に573 Kで50%まで圧縮変形を加えたTi-9Cr合金ミルフィーユ材の断面のBEI像を示す。紙面の上下方向が圧縮方向に対応している。図3の左上に見られるように圧縮後の試験片には内部に一部き裂が発生していたが、50%までの圧縮では試験片の破壊は生じなかった。試験片の一部ではあるがキック状に折れ曲がった変形組織が観察されている。合わせて写真の横方向に $\alpha$ 相が流れたような組織も観察されており、圧縮変形によってせん断変形が導入されていることが示唆される。同様のキック状の変形組織は他の温度での圧縮試験でも観察されている一方、どの温度での圧縮においても試験片の一部にとどまっており、今後より多くのキックを導入するための変形条件や変形手法の検討が必要である。

図4に図3の箇所を電子線後方散乱回折(EBSD)によって

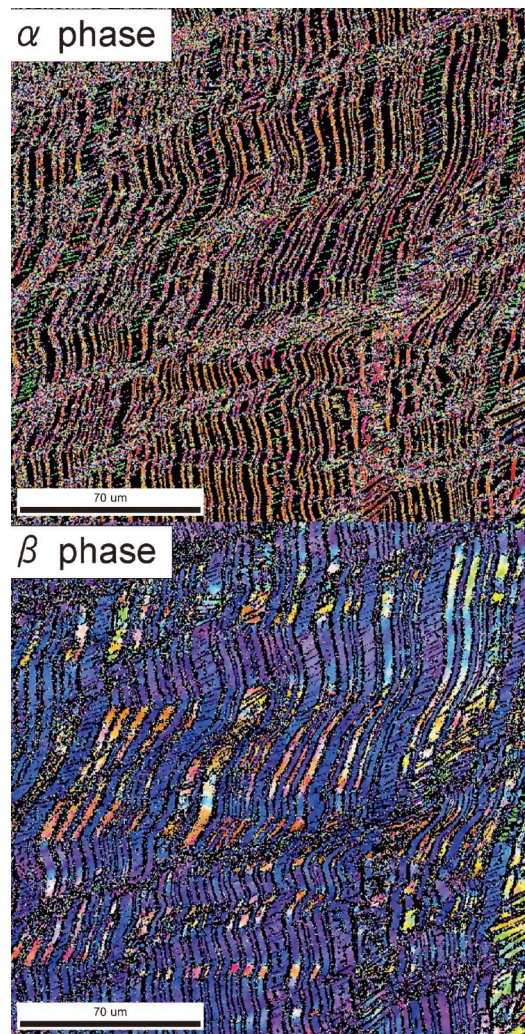


図4 図3と同じ箇所のEBSD解析結果<sup>(2)</sup>。

測定した逆極点方位マップ(IPF)を示す。図4に示した方位は圧縮方向(紙面の上下方向)に向いたものである。 $\alpha$ 相、 $\beta$ 相ともに結晶方位の変化や方位回転が確認されている。今後詳細な解析を進めることでせん断変形とキック状変形の関係等を検討していく。

本研究は JSPS 科研費新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」における計画研究 JP18H05482の助成を受けたものです。ここに謝意を表します。また物質・材料研究機構構造材料研究拠点上路林太郎博士，東京大学大学院工学系研究科榎学教授，白岩隆行講師，Fabien Briffod 助教をはじめとする共同研究者の方々に厚く御礼申し上げます。

## 文 献

- (1) S. Emura and X. Ji: Mater. Trans., **61**(2020), 856–861.
- (2) 江村 聡，上路林太郎：軽金属学会第142回春期大会講演概要(2022), 147–148.
- (3) 江村 聡：軽金属学会第140回春期大会講演概要(2021), 87–88.

- (4) H. Liu, F. Briffod, T. Shiraiwa, M. Enoki and S. Emura: Mater. Trans., **63**(2022), 319–328.
- (5) F. Briffod, J. Zhu, T. Shiraiwa, M. Enoki and S. Emura : 軽金属学会第142回春期大会講演概要(2022), 149–150.



江村 聡

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
 1991年3月 東京大学大学院工学系研究科修士課程修了  
 1991年4月 科学技術庁金属材料技術研究所(現国立研究開発法人物質・材料研究機構)研究員  
 2016年4月- 現職  
 専門分野：チタン合金，熱処理，金属組織制御  
 ◎β型チタン合金を中心としたチタン系材料の加工熱処理による金属組織制御や機械的性質の向上に関する研究に従事。  
 ★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



# 先端材料開発に向けた、AI 先端計測技術の 多角的視点からの考察 (第2回)

岡本和也\* 杉山昌章\*\* 武藤俊介\*\*\*  
青柳里果\*\*\*\* 富谷茂隆\*\*\*\*\*

## 第2回のはじめに

先端材料研究において重要な先端的な検査・計測・分析技術(本稿では「先端計測技術」と略す)において、AI/ML (Machine Learning: 機械学習)技術の視点が大きく取り込まれようとしている。ここにはデータ駆動という新しい概念が含まれ、従来のような単なるハードウェア開発を主軸においた領域だけではなく、この思想を巧みに活用することで先端計測分野の装置開発や原理に関わる研究への新しい糸口になりえる。前回は、このAI先端計測技術に関わる背景と概要を述べ、さらに電子顕微鏡分野における「マルチモーダル計測」を取り上げた(前回3.1節)。これは、多角的な測定情報に対し異なる技術の組み合わせ・複合化によるデータの記述座標軸を増やし、かつ変数相互の相関関係を巧みに取り入れ、高効率かつ高精度に物理量を統合解析する概念である。さて、第2回はこれを時間軸に展開した「オペランド計測」について3.2節から解説を始める。次に、スペクトルにおけるピークの多様性を数値化する「情報エントロピー計測(3.3節)」について述べる。さらに、先端計測分野の産業動向を知的財産情報等の視座から捉えた社会科学思想についても言及する。

### 3.2 オペランド計測

「Operando」はラテン語の動名詞であり、Working, Oper-

atingの意味を持つ。計測・分析領域にオペランドという用語を最初に用いたスペインの触媒研究者 Bañares らは、「オペランド計測とは触媒動作中に分光学的評価と触媒活性測定を同時に行う手法である」と定義している<sup>(1)</sup>。このようにオペランド計測は触媒研究から端を発したが、その後、電池や半導体デバイスなど他の領域に適応され、実際の使用環境下で反応やデバイスを動作させながら、変化する現象を観察することで測定対象と機能との相関を見出す手法として広がっている。しかし、実際の使用動作環境を分析装置内で再現することは容易ではなく、そのための技術開発課題は多々あり、その意味でもAI/MLを組み合わせた新たな取組みが必要な領域である。一方、Operando分析を包含する、より広い意味で*in-situ*分析という用語を用いられることもあるが、この文字通りの意味はon site, in position(本来の場所)であり、必ずしも時間の概念が十分に含まれていない点で区別できる。ここでは、「適切に材料・デバイスに光・電気などの外場を与え、その機能の動的変化を時間発展的に観察・計測する手法」をオペランド計測の定義とし、時間発展という視点から様々な事例を取り上げ、AI/ML技術の活用について今後の展望について述べる。以下では、取り扱う現象の時間スケールを短時間(フェムト秒から秒)と長時間(時間から年)とに大別して考える。

#### 3.2.1 短時間の領域で考える現象

光・電子デバイスでは電子などのキャリア挙動、触媒や電池など化学デバイスでは化学反応、また、構造材料の場合は

\* 山口大学大学院; 教授・副研究科長(〒755-8611 宇部市常盤台2-16-1), 大阪大学エマージングサイエンスデザインR<sup>3</sup>センター; 招聘教授

\*\* 大阪大学大学院; 特任教授 \*\*\* 名古屋大学未来材料・システム研究所; 教授 \*\*\*\* 成蹊大学; 教授 \*\*\*\*\* ソニーグループ株式会社 R&Dセンター; 主幹研究員

Advanced Measurement and Analysis Systems Using AI/ML for Next Generation Materials Development—Multifaceted View 2—; Kazuya Okamoto\*, Masaaki Sugiyama\*\*, Shunsuke Muto\*\*\*, Satoka Aoyagi\*\*\*\*, Shigetaka Tomiya\*\*\*\*\* (\*Graduate School of Innovation and Technology Management, Yamaguchi University, Ube. \*\*Graduate School of Engineering, Osaka University, Suita. \*\*\*Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University, Nagoya. \*\*\*\*Faculty of Science and Technology, Seikei University, Tokyo. \*\*\*\*\*R&D Center, Sony Group Corporation, Atsugi)

Keywords: measurement, metrology, electron microscopy, AI (artificial intelligence), machine learning, multimodal, operando, information entropy, innovation, intellectual property

2022年3月30日受理[doi:10.2320/materia.61.579]

瞬間的な破壊挙動などが短時間で生じる現象が対象となる。図1に半導体における光励起ダイナミクスの流れを示す。光を吸収してから様々な素過程を経て、おおよそフェムト秒(fs)からナノ秒(ns)の範囲で現象が完了する。フォトリソの重合反応の場合、その化学反応機構により異なるが、時間スケールはおおよそマイクロ秒( $\mu$ s)から秒(s)の範囲である。このような現象に対するオペランド計測では、目的とする機能が発現できるような環境を構築もしくは加工することが必須となる。例えば、実際のLiイオン二次電池構造のままでは、電池内部の活物質の充放電時における電子化学反応に伴う電子状態の変化をX線吸収微細構造(XAFS: X-ray Absorption Fine Structure)により把握することはできないため、図2(a)に示すような実電池と同様に充放電が進行する特殊な電気化学セルを工夫して作製する必要がある<sup>(2)</sup>。図2(b)にはこのセルにより得られたLiCoO<sub>2</sub>のCo-K吸収端XANES(X-ray Absorption Near Edge Structure)スペクトルの充放電に伴う変化の実例を示す。オペランド計測の成否はこのように測定環境の構築やデバイス化設計・製作が鍵となる。超高速現象のオペランド計測手法として、レーザー光を用いたポンプ-プローブ法がよく用いられる。短いレーザーパルス光を試料に照射・励起することで非平衡状態を作り、プローブ光で光学定数の変化を検出するなど光物性評価によく用いられる。この手法を放射光計測に適用することで、光触媒反応における構造変化を100 ps という高い時間分解能での観察が可能となっている<sup>(3)</sup>。このように高速な現象を捉えるには、①現象の時間速度に応じた光源・プローブ、②短時間で大量な計測データに対応する保管・転送する技術、③制御のためのデータ読み出し技術、④効率的に実験を行う方法論などの多角的視点からの検討が望まれる。④においては、放

射光などの共用設備を利用する場合など、限られた使用時間内で目的を達成するために逐次ベイズ推定法を活用することにより、次に行うべき実験条件をリアルタイムに推挙してくるシステムの構築が必要となる。この超高速現象の計測はSEMやTEMの分野でも精力的に研究されている。図3にSEMへの応用であるがポンプ-プローブ法を用いた2次元イメージングの例としての走査超高速電子顕微鏡法(SUEM: Scanning Ultrafast Electron Microscopy)を模式的に示す。短パルスレーザーで試料を光励起すると同時に短パルス電子線をプローブとして試料上に走査し2次元電子像を得る。例えば、pn接合を有する半導体試料に電子線が照射されると内蔵電位(拡散電位)が発生し、p型表面とn型表面でコントラスト差が生じるため、SUEMでの2次元電子像コントラストの時間変化をトレースすることによりpn接合近傍のキャリア再結合などキャリアダイナミクスをピコ秒オーダーで時間変化を可視化できる<sup>(4)</sup>。

近年では3次元イメージング可視化のニーズが高まっている。鉄鋼材料を始めとする構造用金属材料には析出物・粒界といった微細構造が存在し、その結晶粒径や結晶方位に依存する材料の機械的性質はその多結晶材料の3次元構造に大きく依存する<sup>(5)</sup>。また、半導体デバイスでも2次元構造での微細化の限界からGAA(Gate All Around)など複雑な3次元トランジスタ構造が検討されており、3次元的な構造形状やその界面近傍における不純物元素分布の解析など、従来のドーパント分布解析とは異なる新たな3次元可視化の要求が強い。3次元微細構造の観察にはX線CT法(X-ray CT: X-ray Computed Tomography)や透過電子線トモグラフィ(TEMT: Transmission Electron MicroTomography)などの手法がある。X線CT法の空間分解能は1~2  $\mu$ m、TEMTのそれは1 nm程度であり、目的に応じて使い分けられる。但し、これらの手法は光源・検出器もしくは試料を回転させながら投影像を取得し時分割で再構成する手法であるため、投影像データセットの取得時間が時間分解能となる。現状では数秒(s)~数百秒(s)にとどまってお<sup>(6)(7)</sup>、より速い現象の変化を捉えるには不十分である。後述するが、試料回転時のデータ欠如部分や画像処理技術へのAI/MLの

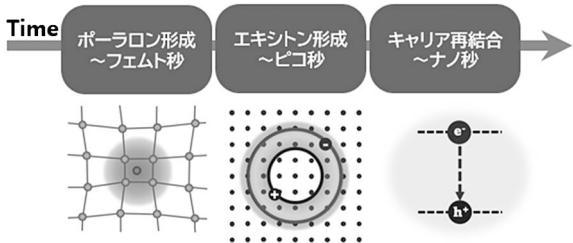


図1 半導体材料における光励起ダイナミクスの流れ。

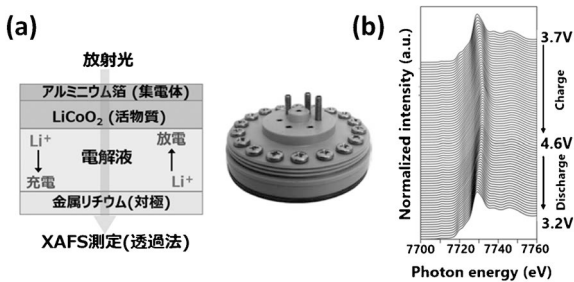


図2 (a) オペランド計測用評価電池セル。(b) LiCoO<sub>2</sub>のCo-K吸収端XANESスペクトルの充放電に伴う変化。

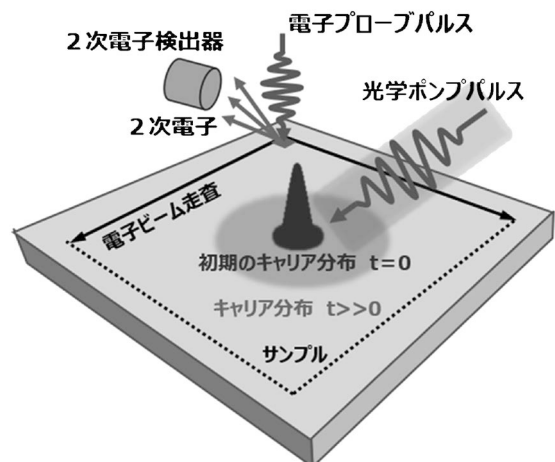


図3 走査超高速電子顕微鏡の像形成メカニズム。

活用が進む。超高速での現象解明には、上述の SUEM と共に UTEM (Ultrafast TEM) がこの10年間、精力的に世界中で研究されている。

### 3.2.2 長時間の領域で考える現象

先端材料やデバイスの劣化機構の解明や寿命の予測は、安心・安全なものづくりに必須である。このため、素材やデバイスの摩耗劣化や材料の疲労・腐食など何らかの特性劣化現象を捉えるには、(加速寿命試験を行う場合においても)長時間にわたる計測は必須となる。

半導体デバイスの例で考えると、LSI の基本構成要素である MOS トランジスタにおいてゲート酸化膜の絶縁破壊がしばしば問題となる。酸化膜の絶縁破壊強度よりも低い実使用電界強度で時間の経過とともに破壊が起こる現象は、経時的絶縁破壊 (TDDB : Time Dependent Dielectric Breakdown) 故障と呼ばれる。この TDDB のメカニズムとして、電流注入による電子トラップが発生・増殖し、電流パスが形成されるというパーコレーションモデルが広く知られており、ゲート酸化膜の膜厚が薄くなるにつれ TDDB 故障は顕在化する<sup>(8)</sup>。半導体微細化の進展に伴いゲート酸化膜の材料変革と薄層化は継続しているため、TDDB 故障は引き続き重要な信頼性課題である。例えば、薄膜化を回避するため High-k 材料など高誘電率の代替材料などが用いられるが、この場合、多量の電子トラップが内在する課題が生じている。このように TDDB 故障は、膜厚、膜密度、膜組成や不純物など複数の要因が複雑に絡み合う。これらの破壊現象に対しては、静的な分析・解析結果のみから正しく寿命・劣化予測を行うことは困難であるため、寿命加速試験を行いワイブル分布に従って予測する。しかしながら、複雑で複数の要因が絡みあうため単純な物理モデルでは予測できない場合も生じ、様々なモデルが提案されている。さらに近年、単一のモデルのみでは整合せず複数のモデルを組み合わせるとよという報告がなされている<sup>(9)</sup>。また、電子トラップ密度の時間変化を追いながら、複数モデルを融合するアンサンブル学習などの AI/ML モデルを活用した寿命予測が考えられる。

電池材料など機能部材をデバイスメーカーに提供する材料メーカーでは、デバイスに実装された状態で材料の信頼性評価を行う必要がある。それはデバイス特性との相関性を理解することで、より良い製品の提供につながるからである。例えば、サイクリックボルタンメトリー (CV : Cyclic Voltammetry) や交流インピーダンスなどのデバイス特性評価と X 線回折、XAFS 測定など物理解析を同時に行える評価デバイスを作製する。この評価デバイスによるオペランド分析から材料の劣化度を予測し、劣化モデルを導く。さらにデータを蓄積し、オペランド分析結果から電極材料の化学・物理構造、電極材料製造などの最適化条件を導き出すマルチタスク深層学習モデルを構築し、より良いデバイスの作製指針を見出すことができることが期待される。これらの一連の流れを概念図として図 4 に示す。

社会インフラを担う構造材料は多様な環境下で使用されるため、定期的な外観検査で劣化具合を判断し、保守・修繕時期を推定している。しかし、コスト削減には現地・現場に赴

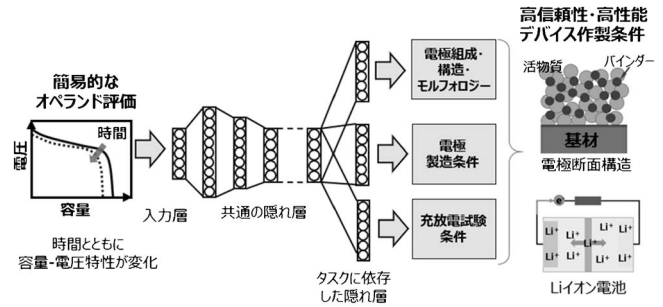


図 4 マルチタスク学習を用いた高信頼性・高機能電池デバイス作製条件探索法の概念図。

いて実施する外観検査の回数を減らしたい一方、安心・安全のためには検査頻度を減らすわけにはいかない。この相反に対峙する施策としての取り組みも、時間軸の長いオペランド計測と考えると興味深い。最近では、腐食データなどの蓄積や気象環境データまでも併せて AI/ML により統合化し、インフラ維持管理の効率化のプロジェクトが国土交通省などを中心に展開している。このような長期現象よりももう少し時間軸は短いものの、製品を上市する前のオペランド加速試験により何らかの特徴指標を抽出することも重要である。例えば、組織学的因子 (粒径、結晶方位変化など)、電気的因子 (電位など) や機械的因子 (残留応力、塑性歪) など複数のデータセットから、マルチモーダル学習など AI/ML 技術により、機械的特性に紐づいた劣化指標を導き出す研究もおこなわれている。ただそのためには種々の特徴因子と劣化指標との相関を見出すことがまず必要であり、最近では、微小クラックの形状から機械学習により破壊との相関を見出そうとする研究なども始まっている<sup>(10)</sup>。

また近年、文化財保護制度の見直しが行われるなど、文化財の劣化に対する対策にも社会的ニーズが高まっている。文化庁では木造建築物の劣化を AI で点検するシステムの試験運用を始めるという動きも始まっている。文化財の保存にはカビの発生が大敵である。微生物による損傷例などの研究に基づき、カビ臭のイオン移動度スペクトルやガスクロマトグラフィ質量分析 (GC/MS) データベースを構築し、真菌種同定ソフトウェアの開発に伴い未知の真菌種の特定などに役立てられている<sup>(11)</sup>。現在では、温湿度や空気中の質 (CO<sub>2</sub> や有機物など) をリモートでモニタリングし、マルチモーダル学習によりカビの発生を予測することも検討されており、AI と IoT 技術を活用したリモートオペランド計測による劣化予測は文化財保護にも期待がかかる。

### 3.2.3 オペランド計測に必要な AI/ML 技術

上述の通り、オペランド計測に関し時間スケールを 2 つに大別し、具体例をあげながら今後の展望や課題などを述べてきた。特に、AI/ML 技術の活用が必要な事項を以下に要約する。

- (1) 逐次ベイズ推定法などにより、次に行うべき実験条件をリアルタイムに情報を抽出する技術。
- (2) 少ないデータを補間しつつ、物理的に有意な情報を抽出する技術。



- (3) アンサンブル学習法などの AI/ML 技術から、複数の物理モデルに対応した結果を予測する技術。
- (4) 簡易計測のみからマルチタスク学習など AI/ML 技術で最適化特性/条件を見出し、結果を予測する技術。
- (5) 複数の計測手法から得られるマルチモーダル学習などの AI/ML 技術から結果を予測する技術。
- (6) AI/ML 技術と IoT 技術を活用したリモート計測で結果を予測し、所望の状態を維持する技術。

上記の項目(1)から(3)は従来型の個別の研究により技術進化させていくことが可能である。特に項目(2)に関してはオペランド計測では多量のデータが得られるものの、その時々で得られる(信号強度、エネルギー分解能や空間分解能などの)情報量が静的な計測に比べて少ないことにある。それゆえ、少ないデータから多くの意味ある情報を復元し、抽出することが重要である。しかし、ここで注意すべきは完全なデータ(真値)からどこまでデータが削減されていたら、科学的に妥当な結果が担保されているかを見極めておくことである。項目(4)はデバイスメーカーと材料メーカーとの連携、さらには AI/ML 技術の専門家集団との連携、項目(5)は異なる先端計測技術の専門家の融合が必要であり、垣根を越えた研究連携の必要性が問われる。項目(6)のリモート計測の領域では、情報管理における社会的ルールの構築も必要であり、真に未来社会を構築するという前提での大きな議論が必要である。このようにオペランド計測という本当に望まれる環境下での計測技術を深化させていくためには、その研究開発体制や情報交換の進め方においても新しい挑戦的仕組みと取り組んでいかないといけない。このような議論が学会や産官学連携の場でも必要になるであろう。

### 3.3 情報エントロピー計測

20世紀中頃に Claude Shannon が情報量を表す指標として、確率に基づいて計算する情報エントロピー(Shannon エントロピー)<sup>(12)</sup>を提唱してから70年以上経った現在、情報エントロピーの応用先は様々に広がっている。統計力学と情報科学に基づいた量子情報科学分野は、物理学と情報科学の両分野に刺激を与えている。特に、シグナル検出が関係する計測分野にとって、量子情報科学は今後大きな影響を及ぼす可能性がある。ただし、本稿では現状の多くの計測におけるシグナル検出は古典物理学で説明されるものとして、量子情報科学に深くは触れない。本節で用いる情報エントロピーは、次式(1)の Shannon エントロピー  $S$  を指す。

$$S = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (1)$$

ここで、 $p$  は各事象が起こる確率、 $n$  は事象の総数を示す。情報エントロピーは、例えば文章の情報量を使用した文字の多様性で表す<sup>(12)</sup>ことができるが、同様の考え方をスペクトルデータやイメージデータに適用することができる<sup>(13)(14)</sup>。具体的には、検出される各情報を 0 から 1 の間に規格化すれば、式(1)を用い様々なデータの情報エントロピーが計算できる。例えば、スペクトル上のピークの強度が出現確率に対応すると考えると、情報エントロピーを用い

て、スペクトルにおけるピークの多様性を数値化できる。

#### 3.3.1 情報エントロピーのスペクトルへの応用

スペクトルデータを数値化する際の代表的な課題として、ピークとノイズの区別、重なり合ったピークの分離などを実施するピーク認識が挙げられる。実際の計測では、ノイズと明確に区別できる高強度で形状の整ったピークが必ずしも得られるわけではない。ここではピーク認識手法については論じず、何らかの方法でスペクトル上のはほぼ全てのピーク強度を数値化したものと仮定し、情報エントロピーがどのように応用できるかを説明する。

データ例として飛行時間型二次イオン質量分析(TOF-SIMS)を取り上げる。TOF-SIMS では一般に質量電荷比  $m/z$ : 0~2000 程度の範囲でスペクトルが得られ、一般的な有機物の分析では1000本程度の質量ピークがスペクトル上に存在する。

情報エントロピーにおける確率が TOF-SIMS スペクトルの何にあたるか考えると、値として 0~1 の間に収まるデータと捉えればピーク強度を 1 以下に規格化すれば良いことになる。最小値を 0 に最大値を 1 とする規格化(正規化, min-max scaling, min-max normalization)を適応させれば、ピーク強度を確率  $p$  として情報エントロピーは式(1)で計算できる。もしくは、各ピークのスペクトル上での存在確率を考えると物理的意味が捉えやすいかもしれない。その場合、全てのピーク強度の合計(総二次イオン強度)で割ったピーク強度(相対強度)を確率として、式(1)に代入することができる。どちらの求め方でも、スペクトル上に一本だけピークが存在する場合は情報エントロピー  $S = 1 * \log 1 = 0$  と最小値になる。スペクトル上に多数のピークがほぼ同強度で存在する場合、情報エントロピーは最大値に近い。例えばスペクトル上に10本のみピークが存在し、全てのピーク強度が0.1であるとし、この強度をそのまま  $p$  として計算すると、情報エントロピー  $S$  は式(2)で求められる。

$$S = (0.1 \log 0.1) \times 10 = 1 \quad (2)$$

したがって、スペクトルの情報エントロピーはスペクトル上のピークの多様性を表す指標と考えることもできる。ピークの多様性が高いということは一般的には測定部の物質の多様性(物質の種類および配向・混合状態などの種類が多様であること)が高いと考えられる。つまり、情報エントロピーは異なる物質が接する界面や多くの物質が混合した部分で高い値を示す傾向があると言える。モデル試料データとして、ガスクラスターイオンビーム(GCIB)を用いた TOF-SIMS 測定におけるマトリックス効果について評価した例を示す。これは2014年の VAMAS プロジェクト<sup>(15)</sup>で用いられた 2 種類の有機物多層膜の TOF-SIMS データ<sup>(16)</sup>である。マトリックス効果は二次イオン質量分析(SIMS)の場合、共存物質などの影響によって二次イオン収率が変化することを指し、マトリックス効果の影響が大きいと二次イオン強度が由来する物質濃度に応答せずに増大したり抑制されたりするため定量分析が難しくなる。マトリックス効果の程度は物質の組み合わせや試料の種類などによって大きく異なるため、未知物質も含む多成分系の測定が多い TOF-SIMS では大きな課題の

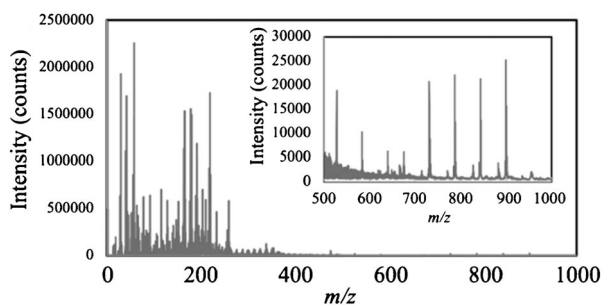


図5 有機物積層試料 (\*Irganox 1010 & \*\*Fmoc-PFLPA)の正二次イオンスペクトルの例.

\*Irganox1010: Pentaerythritol tetrakis (3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl) propionate)

\*\*Fmoc-PFLPA: Fmoc-pentafluoro-L-phenylalanine

一つである。ここで紹介するデータは、スパッタリングにArクラスターイオンビーム、分析にBiクラスターイオンビームを用い、有機物の深さ方向分析で推奨されているように分析領域より十分に大きなスパッタ領域を確保した。GCIBによるスパッタリングで試料の最表面層数nm程度を除去したのち、Biクラスターイオンで測定しTOF-SIMSスペクトルと二次イオンイメージデータを取得する過程を試料の最表面から基板に到達するまで繰り返した。TOF-SIMSスペクトルの例<sup>(16)</sup>を図5に示す。試料に含まれる物質が既知であり、その物質から発生する質量ピークについての知見がある場合、注目するピークの強度を各深さについてプロットすることで(図6(b)),各深さでの試料の状態が分かる。しかし、未知試料や注目すべき質量ピークに関する知見がない場合、スペクトルを解釈し重要な質量ピークを探さなければならない。未知試料のTOF-SIMSスペクトルの解釈は一般に容易ではないため、スペクトル解釈を待たずにスペクトルの情報エントロピーから試料の状態の概要を知ることができれば解析にとって有用である。図6(a)に示すように、スペクトルの情報エントロピーの値は最表面層(第一層:図6(a)A層)と第二層(図6(a)B層)の間、および第二層と第三層(図6(a)C層)の間のような純成分層の界面では上部層と下部層の物質両方に由来する質量ピークが検出されスペクトル上のピークの多様性が高まるため、結果として情報エントロピー値が上昇する<sup>(13)</sup>。また、有機物膜と基板との界面(スパッタ時間180~190s近傍)で情報エントロピー値の上昇が顕著に現れている。ここでは有機物層由来とSi基板由来の質量ピークが検出されることに加え、Si基板上の有機物膜が最薄となることで基板の影響を受け有機物由来の質量ピーク強度が増大する。すなわちスペクトル上でほとんど無視されていた低強度ピークも十分な影響力を示す強度に増大することにより、結果としてピーク多様性がより増大したと考えられる<sup>(13)</sup>。さらにスパッタリングが進むと有機物膜が完全に除去されSi基板の露出する部分が増え、質量ピークの多様性が減少し最終的にはSi基板由来のみの質量ピークだけ検出され情報エントロピーは最小値となる。このように、各深さ(1次元データ)でのスペクトルの情報エントロピーを求める

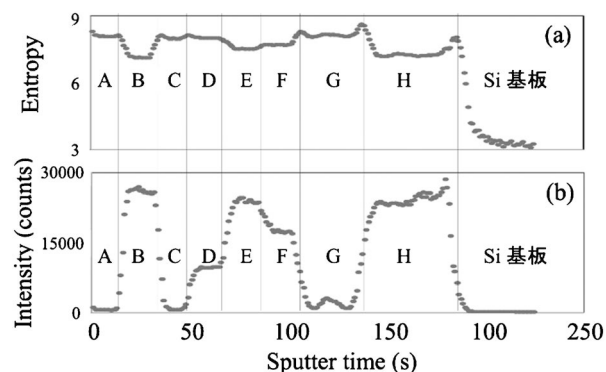


図6 (a) Fmoc-PFLPA (Fmoc)と Irganox1010(Irg)混合試料における正二次イオンスペクトル情報エントロピー(縦軸)の各深さ(スパッタ時間)の関係, (b) Irganox1010由来の二次イオン  $m/z$  163(縦軸が二次イオン強度)の深さ方向プロファイル.

A: Fmoc 100%, B: Irg 100%, C: Fmoc-PFLA 100%, D: Fmoc : Irg = 20 : 80, E: Fmoc : Irg = 80 : 20, F: Fmoc : Irg = 50 : 50, G: Fmoc 100% (中央に3nmのIrg層), H: Irg 100% (中央に3nmのFmoc層).

ことにより、注目すべき二次イオンが分からない試料についても、物質の変化や混合状態変化について概要が得られることになる。

### 3.3.2 未知試料からのスペクトルへの応用

化学イメージングが得られる計測データでは、スペクトル上のそれぞれのピークに対応する分布図がある。一般的には、注目する物質に関連するピークについて分布図を描くことによって解析を進めるが、注目するピークが分からない場合、スペクトル上の全てのピークの分布図を確認するのは現実的ではない。多変量解析やAI/MLによる解析によって重要なピーク候補が示されることも多いが、そのような解析結果を得るためには時間と労力が求められる。そこで、データの概要が分かる解析法があれば未知試料についてどのような解析を進めるべきかの指標が得られ、数値解析をする際にも有用である。スペクトルの情報エントロピーはスペクトル上の全ての質量ピーク情報に基づいて試料の概要を示す手法であり、このような目的には有効と考えられる。実際に、この有機物多層膜試料の断面(2次元データ)について、各ピクセルでのスペクトルの情報エントロピーを計算すると、図7(a)に示すように各位置におけるスペクトルの情報エントロピー値を用いたイメージングが可能である。スパッタリング時間は試料の深さに対応し、この試料の場合は情報エントロピー値が上昇するスパッタリング時間(破線で示す)がほぼ界面に対応している。情報エントロピーは物質の変化によって値が変化するため総二次イオン像(図7(b))よりも情報エントロピー像の方が物質変化が分かりやすい。総二次イオン像と情報エントロピー像の両方を比較することにより、試料の概要が理解しやすくなることが期待される。

このように、数値化した測定データ(デジタルデータ)は測定手法が示す物理・化学信号だけではなく、データそのものが持つ情報量を手掛かりに解析することが可能であり、さらにそのように得られたデジタルデータの情報から物理化学的

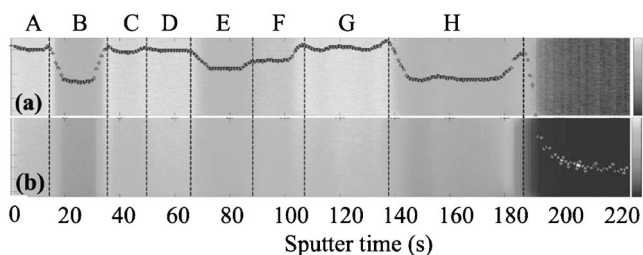


図7 Fmoc-PFPLA と Irg1010混合試料における断面図。(a) 各ピクセルにおける正二次イオンスペクトルの情報エントロピー強度図(図中のプロットは数値強度の変化を示す), (b) 総二次イオン像(正二次イオン)

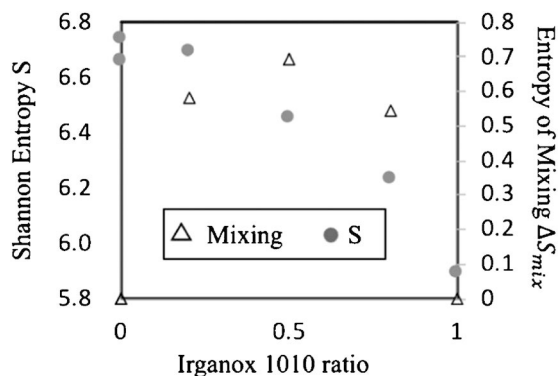


図8 Fmoc-PFPLA と Irg1010混合試料 TOF-SIMS 正二次イオンスペクトルの情報エントロピー  $S$  と混合のエントロピー  $\Delta S_{mix}$  の関係。

な知見も得られる。例えば、図8にモル数に基づいて求めた混合のエントロピーと TOF-SIMS スペクトルの情報エントロピーの関係を示す。同図の混合のエントロピーは式(3)で求めた。

$$\Delta S_{mix} = -n_A R \ln \frac{n_A}{n_A + n_B} - n_B R \ln \frac{n_B}{n_A + n_B} \quad (3)$$

$n_A$  と  $n_B$  はそれぞれ物質 A と B のモル数を示し、 $R$  は気体定数である。ただし、混合によって体積変化および熱変化がないものとして、二種類の物質 A と B の混合によるエントロピー変化を求めた。スペクトル上の質量ピークは、試料中の物質の混合状態を反映しているが、各物質の濃度に線形応答するとは限らない。二種類の物質の混合比とピークパターンが線形応答する場合は、スペクトルから求めた情報エントロピーは、二種類の物質が等分ずつ存在する(濃度0.5)で最大値を取るはずである。しかし、マトリックス効果によって TOF-SIMS データの濃度応答性が崩れたため、スペクトルから求めた情報エントロピーの最大値は Irganox 1010 低濃度域で得られている。一方で混合のエントロピーは Irganox 1010 と Fmoc-PFLPA が同濃度存在する0.5が最大値となる。マトリックス効果の影響が小さい TOF-SIMS データの場合は実際に情報エントロピーの最大値は混合のエントロピーと等しく0.5に近づく<sup>(13)</sup>。

### 3.3.3 熱・統計力学でのエントロピーとの関連

本節の最後に、情報エントロピーと熱・統計力学のエントロピーの関連について簡単に述べる。情報エントロピーと

熱・統計力学のエントロピー  $S$  は異なるものではあるが、両方を考慮する重要性は以前から指摘<sup>(17)(19)</sup>されていた。熱力学第二法則  $\Delta S \geq 0$  に情報量  $I$  を含めて  $(\Delta S + \Delta I) \geq 0$  に拡張した場合、情報の変化量  $\Delta I$  は情報エントロピーの減少分  $-\Delta S_{info}$  と等しくなるため、 $\Delta I = -\Delta S_{info}$  であり、

$$\Delta S - \Delta S_{info} \geq 0 \quad (4)$$

$$\therefore \Delta S \geq \Delta S_{info} \quad (5)$$

となる。これは物理系を測定することにより情報を  $\Delta I$  得ると、それ以上に測定装置も含めた全体のエントロピーが増加することを意味する<sup>(17)(18)</sup>。ただし、情報エントロピーの変化量は熱・統計力学のエントロピーよりもはるかに小さく、一般に無視できる。現在では、先端計測機器の技術が発展し1原子・1分子(場合によってはそれ以下)の計測が可能になり、極めて高い空間分解能で物質の物理化学情報(結晶構造・化学構造など)を複数の視点で得られるようになった。さらに、このような高度な計測手法から得られた複雑な計測データを AI/ML 技術によってより高度に数値解析できるようになった現在、情報量と物理量の関係を改めて見直すことに意義があると考えられる。実際に、2010年に「マクスウェルの悪魔」と同様の状況の実験的再現<sup>(19)</sup>が報告され、フィードバックする情報をシラードのエンジン(分子の存在を観測し、その結果に応じて操作を変えることでエネルギーを取り出すこと)のように表現することにより、熱・統計力学のエントロピーに変換できることが明確に示された<sup>(20)</sup>。情報エントロピーが熱・統計力学のエントロピーに変換できる系があることから、条件を整えばスペクトルの情報エントロピーから熱・統計力学のエントロピーを導ける可能性もあることが分かる。つまり、試料の化学情報が得られるスペクトルを測定することにより、試料のエントロピー、自由エネルギーなどが予測できる可能性がある。この点については慎重な検討が必要であるが、先端計測技術から得られる情報が大いに広がることが期待できる。

## 4. AI 先端計測の社会科学的考察

本章では先端計測技術の産業を俯瞰し、知的財産情報を中心にした社会科学的な考察を行う。各産業における市場の競争状態(集中度)を表す指標の一つとして、寡占度指数であるハーフィンダール・ハーシュマン指数 ( $HHI$ : Herfindahl-Hirschman Index) があり、式(6)のように当該産業に属する全ての企業の市場占有率の2乗和で定義される<sup>(21)</sup>。

$$HHI = \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (6)$$

ここで、 $S_i$  は市場占有率、 $N$  は当該産業の企業数である。本稿の対象である先端計測分野18領域(35項目)の国内市場<sup>(22)</sup>における  $HHI$  の年次推移を1992年から30年間を計算した結果、分野により年次変動は見られるものの、いずれの機器分野においても  $HHI > 2500$  にあり<sup>(23)</sup>、高位寡占市場<sup>(21)</sup>に該当することがわかった。つまり、どの先端計測機器も平均30%程度以上の市場占有率を有する数社独占で市場は形成されており、この前提をもとに考察を展開する。



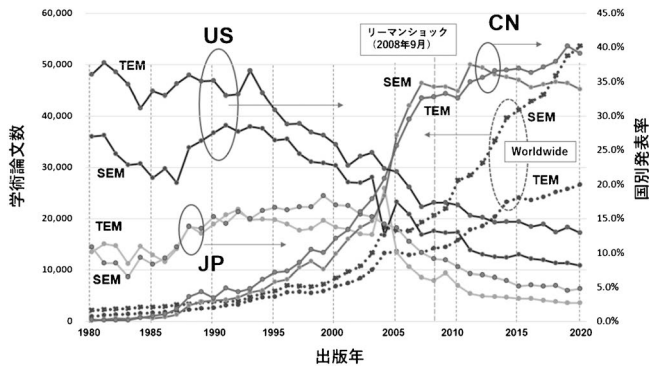


図9 電子顕微鏡に関する学術論文数(破線)と国別発表率(実線)の推移。(US:米国, CN:中国, JP:日本).

#### 4.1 学術性と産業性に関する考察

学術的価値を示す代表的指標が学術論文である。一方、産業的価値の当該指標として知的財産権の一つである特許権の行使に至る特許を本稿では提起する。ここでは、その出願状況から技術と産業へ視野を広げ、代表的な先端計測技術および機器の動向を把握すると共に、AI/ML活用との親和性を考察した。誌面の都合上、委細は省略するが、特許出願数から見る研究開発投資効率<sup>(24)</sup>は先端計測産業全般として低下の傾向にある。その中で調査研究<sup>(25)</sup>の結果として得られた日本での産業競争力の強い分野の一つはSEMであり、これを中心にTEMや他の技術との比較を行い学術性と産業性の双方から考察する。

まず、学術性について、図9に両者の全世界の学術論文の年次数(破線: worldwide)及び国別発表率(実線)の推移を示す。学術論文数(破線)は両者とも増加の傾向にあるが、その伸長率は2000年ごろから急伸するものの、2005年以降、SEMとTEMの年平均成長率(CAGR: Compound Annual Growth Rate)には差異が拡大している。また、国別の傾向からは中国の急伸と2008年のリーマン・ショック時期からは発表率が一定化する傾向が確認されるものの、論文数は35%以上の伸長を示している。日本と米国はSEM, TEMともに発表率は減少しているが、米国に比して日本の減少率は小さく国際競争力の担保に繋がっている。これは半導体技術への先端計測技術適用の重要性とSEMやTEMがその主軸であることに起因するものと考えられる。しかし、AI/ML活用の概念の中で今一度、日本の先端計測技術の底上げが必要と考える。

次に、産業性について特許出願動向から技術の掘り下げを試みる。各機器の特許出願動向(全世界)について、1980年からの代表的な先端計測技術の全世界の累積出願総数(INPADOC: International Patent Documentation Center Family)の時系列変化からいずれの機器分野も増加傾向にあり、産業的価値の意義は深化している。ここでは、SEMおよびTEM領域における過去40年の特許出願動向および学術論文発表から当該技術を確認した。なお、各装置本体(物)に絡む内容とその方法を抽出できるようにクエリを工夫した。

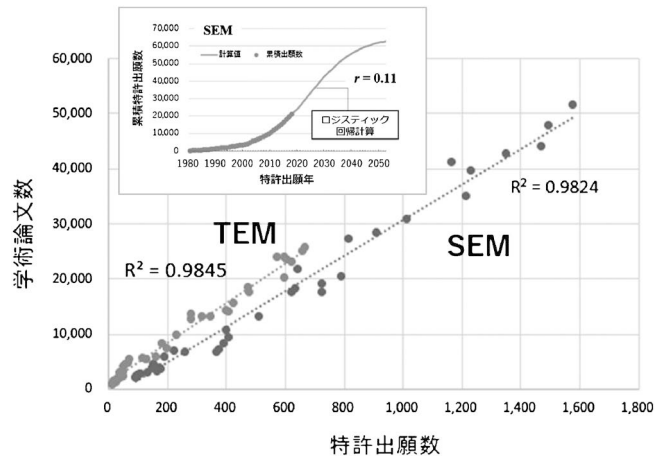


図10 特許出願数と論文数との相関性およびSEMの累積出願数の特許出願数年次推移。

SEMについては、1980年から2020年現在までの全世界ファミリーで年間出願数およびElsevier・Scopusデータベースに抄録された当該領域の単年論文数を抽出し、両者の相関性を図10に示す。特徴的なのは1980年において高い論文数に比して特許出願数は少なく(SEM: 90件, TEM: 13件)、電子顕微鏡分野は学術指向で推進され、その後に産業化に至った分野と考えられる(2018年国内市場はSEM: 131億円, TEM: 72億円)。一方、論文数と特許数には強い相関性(決定変数  $R^2 > 0.98$ )を有し、両者には類似した伸長傾向を有している点が見出された。さらに、両者の特許出願数の増加傾向を確認してみる。ここでは、全世界のINPADOCファミリーでの累積出願数およびロジスティック回帰にて近似計算した。1980年には90件の出願に留まっていたが、2015年には1,577件と20倍弱に至り、累積出願数から計算される成長係数  $r$  は0.11とゆるやかな延伸にあると試算され、特許出願の視点からはSEM領域は産業分野では「萌芽から成長期」といえる。同様にTEM領域についても、1980年には13件の出願が2015年には572件と40倍強になっており、SEMよりはやや急峻な成長係数0.14と延伸にあり「成長期」と判断された(比較として、スマートフォンの成長係数  $r$  は0.68である)。すなわち、電子顕微鏡分野の歴史は古いものの、新しい分野創成が可能な期待領域と考えられる。

#### 4.2 AI関連特許についての考察

AI関連の国内特許出願状況について、特許識別子FI(File Index)のサブクラスG06Nで見ると2015年から2019年までの4年間はCAGR~26.1%であり急伸性が理解できる。しかし、AI/MLを活用した電子顕微鏡分野については、2020年現在でも出願率は0.1%以下と低く萌芽期にあることが判明した。その出願内容について全世界での特許出願データより抽出されたINPADOCファミリー151件について、IPC(International Patent Classification)サブグループを用い、共起グラフからの考察を試みた。結果を図11に示す。自然言語処理の分野では、任意の文書や文においてある文字列とある文字列が同時に出現することを「共起」という。ここでは、各特許に付与されたIPCを文字列と認識し、その共起性を見

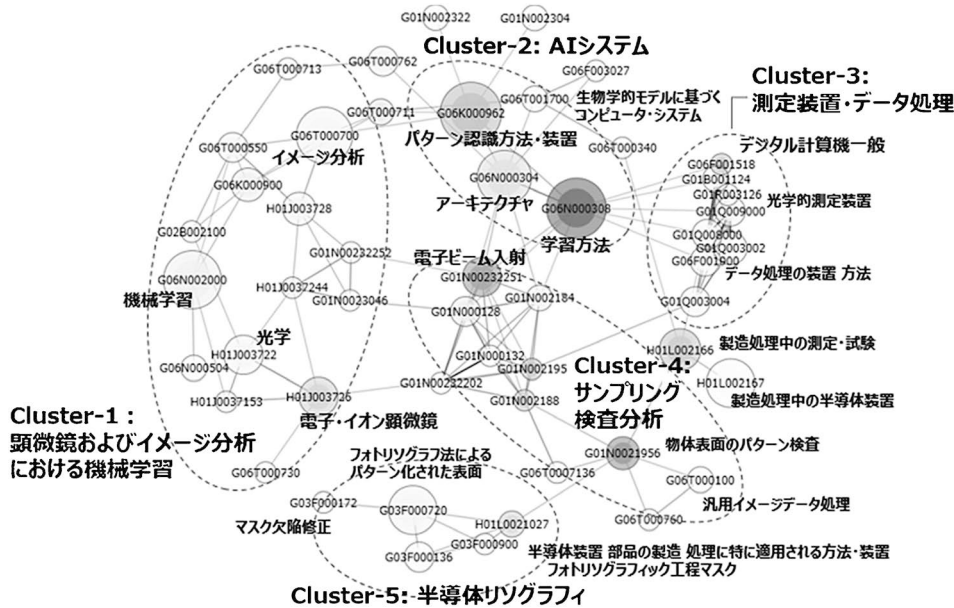


図11 AIに絡むSEM(装置及び方法)：特許出願のIPCコード共起グラフ。

出すことで特許技術の関連性を視覚化した。同図で、○の大きさは出現頻度、○の濃度が高いほど他のクラスタとの媒介中心性が高いことを示す。なお、出現頻度が多く媒介中心性の高いIPCのみその内容を記述した。ここでは、5つのクラスタ(Cluster)にわけられた。さらに、第1回で述べたように、AI先端計測を2つの分類、すなわち、分類(I)：機器にAIを活用し機器の性能・Usabilityを高める自律型、分類(II)：単体もしくはつながる様々な機器から得られた情報にAIを有効活用し新しい領域を発見する複合型、を含めて各クラスタの考察を深めた。

**Cluster-1**：顕微鏡およびイメージ分析に機械学習を適用するクラスタ：分類(II)が主体。

**Cluster-2**：AIシステムに関する：分類(I)が主体。AI技術の基本となるIPC：識別子G06Nであり、Neural Networkを主軸にCluster1とつながる。

**Cluster-3**：測定装置・データ処理：AIシステムにつながる測定装置に関する。分類(II)が主体。

**Cluster-4**：サンプリング・検査分析に関する。分類(II)が主体。

**Cluster-5**：半導体リソグラフィに関する：この分野のマスク検査、パターン検査等に繋がっている。分類(II)が主体。

先端材料向けの適用ではなく半導体の検査計測に関わる出願が主体である。特許出願人を見ると、蘭ASML、米AMD、東京エレクトロン、米Intel、米KLAなど半導体デバイス、半導体製造装置および検査装置の各製造業が圧倒的である。結論として、SEMについては半導体製造における測定検査への応用が圧倒的に多く(いわゆる、Virtual Metrology領域)、得られたデータへ積極的にAI/MLを適用する分類(II)が2021年現在では主流である。最近では、セマンティック分類(画像の意味的分類)に関わるもの、インフォマティクス応用も含まれる。また、装置の自動校正等の分類(I)に関する出願も確認された。

### 4.3 AI先端計測におけるデータの取扱い

AI先端計測におけるデータの取扱いは機微な状況にある。先述のとおり、AI/ML活用のためには優れた基礎データが必要であり、数多く質の高いデータを有する日本はAIの進化において国際的競争優位に立つ格好の機会を得ている。そこでは、データの価値とあり方を再認識すべきである。データの共有化(Data Sharing)においては、Open/Closed戦略のありかたをグローバルに進めるべきであり、研究であっても戦略立案に絡む技術マーケティング手法の導入が必要であろう。以下、3点を提起する。

#### (1) データオープン化の困難性とその対応

一般的に企業の分析データがオープンになれば、クラウドデータ化の時代においては情報拡散による機会損失の恐れが指摘される。オープン化による価値(特に経済的、産業競争力の視点)向上について、具体的なイメージを示しつつ、期待効果とリスクの両側面から検討される場が真に設定されることが重要である。

#### (2) オープン化の可能事例

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)は材料開発効率をあげる上で重要で、その展開においては膨大なデータベースが必要になる。公知の論文や特許情報から、MI戦略として基本的なデータベースが国内では物質・材料研究機構を中心に集約されているが、産業界単位、もしくは大企業の場合は企業単位で、何らかの形で分析データにおけるデータベースの保有活動が行われているであろう。それらの相互活用で新たな競争が起きることが想定される。

#### (3) オープン化に向けた提言

様々な分野において、商品上市までのTAT(Turn Around Time)短縮と一層の品質向上に向け、先端計測と制御が一体となった判断の高速化(自律化・インテグレーション)が求められる時代が来るときには、オープン化戦略は必

須と思われる。ユーザーと装置製造業との個別技術開発は非開示と考えられるが、顧客製品に依存しない重要データを含め、相互に発展できるモデル(本質的に相互に付加価値が低く非効率な領域を共通化することにより効率化・一般化できるモデルを含む共通言語的なもの)およびインフラを整備していくことが出来ればオープン化の可能性があり、それにより今後その戦略において利益を得てくる企業群が現れるであろう。また、共有化することで価値が高まるデータであれば、その新たな仕組みが求められる。そのために暗号化や一部情報のブラックボックス化のような、解析は可能だが個々のデータ内容が判らないような仕組みづくりが出来れば良い。例えば、「暗号化したま AI/ML を行うシステム」が構築されれば、機密保持しつつ AI/ML 結果の恩恵を享受できるという点で、有望な仕組みとなるであろう。

## 5. 総 論

本解説では、社会基盤を支える先端材料研究において鍵となる、先端計測分野に焦点をおき、AI 活用による技術と産業動向について解説した。研究開発の進め方そのものに革新を迫る第3次 AI ブームにおいて、各種データからの情報抽出によるインフォマティクス研究が活況にある。本稿では、AI/ML の歴史から紐解き、先端計測技術への適用性に踏み込んだ。ここでは、データ駆動という新しい概念を含んでおり、従来のような単なるハードウェア開発やソフトウェア開発を主軸においた領域だけではなく、この概念を巧みに活用することで分析装置間の複合化が進むだけでなく、装置開発や原理に関わる研究においても新しい糸口になり得る可能性を秘めている。その具体例として、電子顕微鏡のマルチモーダル計測、時間軸を加味したオペランド計測、二次イオン質量分析を主体とした情報エントロピー計測の3点に注目した。上記、マルチモーダル計測処理に関わり、多種多様な種類の膨大なデータに対し多角的にアプローチしつつ統一的な解を導くために必要とされる工夫や仕組みについて、次の3点が考察される。第一が、共通座標軸の設定(3.1節で述べた STEM スペクトラムイメージデータでは、電子ビーム走査の各標本点で同時に異種分光データを収集するため空間座標が共通な多次元データ構造となる)、第二がデータフォーマットの共通化である。第三として、スキームの構築段階での各スクリーニングステップにおける各計測手法の専門家、情報・材料科学者の洞察による総合的判断が重要であることを掲げる。そのためには、各分野の専門家が混然一体となり議論し正しい解釈を進めるといった場の形成が求められる。分析技術・機器が産業的に高位寡占状態にある今、上記 AI 活用計測の可能性を自然科学および社会科学の双方の広い視野まで拡張し考察した。社会科学思想においては、産業の固定化を見出し日本の産業競争力の高い SEM に着目した。学術的価値として学術論文、産業的価値として出願特許を指標として提起し、両者に高い相関性を見出した。また、同分野の AI 活用は圧倒的に半導体産業への適用性が高いものの、2020年時点においても特許出願率は0.1%にも満たない萌芽

期であり、新しい産業創成の機会が期待され、いくつかの興味深い事案の出願特許も見出された。

今後はデータ駆動の特性を活かした新しい領域への期待がかかる。ESG(環境, 社会, ガバナンス)・SDGs 投資が加速する中、これは一企業で成り立つものでなく、無駄を排除する全体最適の視点でのサーキュラーエコノミーの時代において、AI 先端計測においてもその重要性から全く異次元の Startup 企業の創発など新たな風が起きる気配を感じる。

最後に、DX 人材育成が加速している今、AI 先端計測においても、情報系技術と分析系技術および社会全体を俯瞰できる人材が求められる。その基盤は多種多様な断片的な情報をその人なりに組み合わせて(統合)、自分の次の行動や他の人に提案するための新しい知識を作り上げていくリテラシー、すなわち「トランスリテラシー人材の育成」にあることを強調し、産官学連携のさらなる重要性を提起し結論としたい。

本解説にあたり、日本学術振興会研究開発専門委員会「自律型・複合型 AI 先端計測の新しい価値創造」の委員各位に深く感謝する。

## 文 献

- (1) M. A. Bañares: *Catalysis Today* **100**, **71**(2005), 71-77.
- (2) 後藤習志, 稲葉雄大, 越谷直樹, 細井 慎, 工藤喜弘: サンビーム年報・成果集, **6**(2016), 59-61.
- (3) S. Nozawa, *et al.*: *J. Synchrotron Rad.*, **14**(2007), 313-319.
- (4) B. Liao and E. Najafi: *Materials Today*, **2**(2017), 46-53.
- (5) 波多 聡, 趙 一方, 井原史朗, 齊藤 光, 光原昌寿, 村山光宏: *まてりあ*, **61**(2022), 84-88.
- (6) 鳴海大翔, 河原崎琢也, 加藤藤一, 森下浩平, 安田秀幸: *軽金属*, **70**(2020), 339-346.
- (7) W. Albrecht and S. Bals: *J. Phys. Chem. C*, **124**(2020), 27276-27286.
- (8) J. W. McPherson: *Microelectron. Reliability*, **52**(2012), 1753-1760.
- (9) K. Park, K. Park, S. Im, SE. Hong, K. Son and J. Jeon: *Electronics*, **8**(2019), 942.
- (10) R. Meya, C. F. Kusche, C. Lobbé, T. Al-Samman, S. Korte-Kerzeland and A. E. Tekkaya: *Metals*, **9**(2019), 319.
- (11) T. Takeuchi, T. Kimura, H. Tanaka, S. Kaneko, S. Ichii, M. Kiuchi and T. Suzuki: *Surf. Interface Anal.*, **44**(2012), 694-698.
- (12) クロード・E・シャノン, ワレン・ウィーバー著, 植松友彦訳: *通信の数学的理論*, ちくま学芸文庫(1947).
- (13) S. Aoyagi, K. Mizomichi, K. Kamochi and A. Miisho: *Surf. Interface Anal.*, (in press). <https://doi.org/10.1002/sia.7047>.
- (14) R. M. T. Mадiona, D. L. J. Alexander, D. A. Winkler, B. W. Muir and P. J. Pigram: *Appl. Surf. Sci.*, **493**(2019), 1067-1074.
- (15) A. G. Shard, *et al.*: *J. Phys. Chem. B*, **119**(2015), 10784-97.
- (16) K. Takahashi, S. Aoyagi and T. Kawashima: *Surf. Interface Anal.*, **49**(2017), 721-727.
- (17) L. Brillouin: *Science and Information Theory: Second Edition*, Dover Publications, (2013, 初版1962年).
- (18) 甘利俊一: *情報理論*, ちくま学芸文庫, (2011, 初出1970年).
- (19) S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyukil and M. Sano: *Nature Physics*, **6**(2010), 988-992.
- (20) S. Ito and T. Sagawa: *Phys. Rev. Lett.*, **111**(2013), 180603.
- (21) <https://www.justice.gov/atr/horizontal-merger-guidelines-08192010>
- (22) 科学機器マーケット総覧2020(アールアンドディ, 2020.3.20).
- (23) K. Okamoto, M. Sugiyama and S. Mabu: *e-J. Surface Sci. Nanotechnol.*, **18**(2020), 214-222.
- (24) 岡本和也, 福代和宏: *MOT 研究開発マネジメント入門*, 朝倉書店, (2020), 103.
- (25) <https://jsps-ai-imat.mot.yamaguchi-u.ac.jp/>

# 平面波基底の第一原理計算法(第一回)

香山正憲\*

## 1. はじめに

理論と計算手法の進歩、汎用コードの開発・普及により、物質・材料の研究開発で、第一原理計算が頻繁に用いられるようになってきている。結晶や表面・界面、合金や格子欠陥、アモルファスなど、様々な系の安定構造やエネルギー、諸性質を電子挙動まで掘り下げて探ることができる。実験観察と組み合わせて物性発現の機構を解明したり、近年では機械学習やデータベースと組み合わせて、物質・材料の探索・予測・設計の可能性を広げるなど、第一原理計算は、材料科学・工学に広範なインパクトを与えている。材料研究者も、第一原理計算の原理や汎用コードの計算の概要を理解し、精度や適用性、計算条件の知識を持つことが望ましい。

筆者はこれまで、密度汎関数理論に基づく「平面波基底の第一原理計算法」のプログラム開発や関連する計算手法開発を行い、それらを微視的観察と連携させ、エネルギー環境材料や構造材料の構造や性質の解明・設計に取り組んできた。第一原理計算では、電子の波動関数を何らかの「基底関数」の線形結合で展開する。平面波基底の第一原理計算法は、基底関数に平面波を用いる手法であり、「第一原理擬ポテンシャル法」と総称される手法である。原子間結合を担う価電子のみを扱うので、全電子を扱う方法よりも負荷が少なく、巨大な固有値問題を新規アルゴリズムで効率的に解くので、比較的大規模な構造が扱える。VASP, CASTEP, ABINITなどの汎用ソフトは、全て、この手法を実行するものである。

今回、平面波基底の第一原理計算法の原理、概要、計算技術を講義する。大学院集中講義や勉強会で用いたノートを基にしている。第2章、3章で密度汎関数理論に基づく第一原理計算の全体像を概説する(第一回掲載分)。第4章では、第一原理擬ポテンシャル法の原理を説明し、第5章、6章

で、平面波基底を用いた第一原理擬ポテンシャル法のハミルトニアン、全エネルギー、電子密度分布、原子に働く力等の表式や演算の方法・手順を具体的に説明する(ここまで、第二回、三回掲載分)。原子近傍のポテンシャルや波動関数の取り扱いが鍵であり、また、フーリエ変換など逆空間表現を駆使して効率化を図る。第7章では、Car-Parrinelloの第一原理分子動力学法に端を発する基底状態計算の「高速化技法」について説明する(第四回掲載分)。

## 2. 第一原理計算の基礎：基本的近似と密度汎関数理論

### (1) 第一原理計算とは

本章と次章では、「平面波基底の第一原理計算法」以外の手法も含めた、第一原理計算全体の基礎や方法論を概説する。物質・材料の安定構造や性質は、原子間結合の担い手である電子に支配される。第一原理計算とは、量子力学と統計力学の理論のみにより、物質・材料中の電子や原子の挙動を高精度に再現・予測する計算手法である。分子を扱う量子化学の理論や手法もあるが、結晶や固体には、固体物理で発展したバンド理論が用いられる<sup>(1)-(4)</sup>。本講義では後者を扱う。

結晶のように周期性のある系(同じ構造単位(単位胞, ユニットセル)が繰り返す系)の電子構造は、バンド理論に基づいて計算される(バンド計算という)。さらに電子構造に基づいて、全エネルギー(凝集エネルギー)、安定原子配列、原子に働く力、応力、弾性定数、熱的・電子的・磁氣的・光学的性質等、様々な物理量が計算できる。点欠陥・転位、表面・界面、アモルファスなどの諸構造や、拡散、偏析、変形・破壊、吸着・反応といった諸現象も、大きなセル(スーパーセル)が繰り返すモデル構造を用いて扱える。結晶の単位胞は、比較的単純な金属や化合物では通常1~数原子、スーパーセルは数十~数百の原子を含む。計算時間は原子数(電子

\* 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 エネルギー・環境領域 電池技術研究部門; 名誉リサーチャー(〒563-8577 池田市緑が丘1-8-31 産総研関西センター)

Lecture Notes on First-Principles Methods Using a Plane-Wave Basis Set (Part 1); Masanori Kohyama

(Research Institute of Electrochemistry, Department of Energy and Environment, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Ikeda, Osaka)

Keywords: *density-functional theory, Kohn-Sham equation, Brillouin zone, Bloch's theorem, band structure, self-consistent field*

2021年12月1日受理[doi:10.2320/materia.61.588]



数)の2~3乗に比例して増えるので限界があるが、計算機能力と手法・アルゴリズムの進歩で扱える対象が拡大している。

こうした第一原理計算は、基礎である密度汎関数理論の確立、第一原理擬ポテンシャル法など高精度且つ高効率の手法の開発、基底状態計算の高速化技法の開発など、1980年代から90年代に飛躍的に発展し、基幹部分が開発された。原子の動きのたび毎に大規模電子構造計算を行い、原子の挙動を高精度に扱う第一原理分子動力学法も実現している。材料の機械的性質に関する第一原理計算も急増している<sup>(5)-(7)</sup>。

## (2) 断熱近似と平均場近似

原子核に比べて桁違いに小さな質量の電子は、原子核の動きに速やかに追従し、その時の原子配置に対し瞬時に最安定状態をとると見なせる。従って、通常的第一原理計算では、固定した原子配置の電子構造を計算する(断熱近似, Born-Oppenheimer 近似)。多くの現象はこの立場で扱えるが、電子系と原子系の間に直接のエネルギー移動が生じる現象(格子振動による電子の散乱など、電子格子相互作用)は扱えない。

一方、物質中の電子集団は、静電相互作用とパウリの原理の元で複雑な多体相互作用により運動しており、単純な解析的取り扱いは不可能である。通常、各電子が他の電子からの平均的ポテンシャル場の中で独立に運動しているという描像を用いる(平均場近似)。

パウリの原理からフェルミ粒子である電子の集団の全体の多電子波動関数は、スピンを含めた電子の交換に対しマイナスになる(反対称)。この性質を満たす多電子波動関数の形の一つがスレーター行列式で、ここから平均場近似として、多電子が互いに①静電相互作用と②交換相互作用を持って平均場中を運動する描像が構築される(Hartree-Fock 近似)。この段階では、①、②以外の電子間のダイナミックな相互作用(③相関相互作用(電子相関))は取り入れられない。次節の密度汎関数理論は、実質は平均場近似だが、①、②、③の多電子間相互作用を全て取り入れる試みである。

## (3) 密度汎関数理論

多電子間相互作用の取り扱いが計算の精度を決定する。バンド計算では密度汎関数理論(density functional theory; DFT)<sup>(8)(9)</sup>を用いる。分子を扱う量子化学では多電子波動関数の組み立て(スレーター行列式の線形結合など)を工夫する理論が発達したが、密度汎関数理論は、多電子波動関数でなく電子密度分布  $\rho(\vec{r})$  に着目する。これは、場所  $\vec{r}$  に電子が存在する確率、電子雲の密度分布である。

密度汎関数理論の結論は、(1)原子核やイオンからのポテンシャル場  $V(\vec{r})$  の下での電子集団の基底状態(絶対零度の最安定状態)は、ただ一つの電子密度分布  $\rho(\vec{r})$  を持つ、(2)基底状態の  $\rho(\vec{r})$  は、 $\rho(\vec{r})$  の汎関数である全エネルギー  $E_{\text{tot}}[\rho]$  を最小にする、ということである。ここで汎関数とは、関数の関数という意味。通常関数は、値  $x$  に対し値

$F(x)$  が対応するが、汎関数は関数形  $f(x)$  に対し値  $F[f]$  が対応する。また、汎関数  $F[f]$  は関数  $f$  で微分できる(汎関数微分:  $\delta F[f]/\delta f$ )。

全エネルギー  $E_{\text{tot}}[\rho]$  は次のように表される。

$$E_{\text{tot}}[\rho] = T[\rho] + \int V(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' + E_{\text{xc}}[\rho] + E_{I-I} \quad (1)$$

第一項は電子系の運動エネルギー、第二項は核(イオン)-電子間のポテンシャルエネルギー、第三項は電子間静電相互作用エネルギー、第四項が複雑な多電子間相互作用を全て含む交換相関エネルギー  $E_{\text{xc}}$ 、第五項は原子核間の静電相互作用エネルギーである。第三項に  $1/2$  が付くのは、この積分形では二重に数えるからである。最初の四項が  $\rho$  の汎関数である。平面波基底法では、価電子と価電子を取り去った正イオンの集団を扱うので、 $\rho(\vec{r})$  は価電子密度分布、 $V(\vec{r})$  は正イオンからのポテンシャル、 $E_{I-I}$  は正イオン間静電相互作用になる。

## (4) Kohn-Sham 方程式

密度汎関数理論から、全エネルギー汎関数  $E_{\text{tot}}[\rho]$  を最小にする  $\rho(\vec{r})$  が求めれば、電子構造を解明したことになる。それを求める方程式が Kohn-Sham 方程式<sup>(9)</sup>である。 $\rho(\vec{r})$  が占有された一電子波動関数  $\psi_i(\vec{r})$  の電子密度分布の重ね合わせ

$$\rho(\vec{r}) = 2 \sum_i^{\text{occ}} |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2)$$

で表されるとする(2はスピンの和、 $i$ の和は占有状態の和)。運動エネルギーを

$$T = 2 \sum_i^{\text{occ}} \int \psi_i^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3)$$

とすると

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \text{は運動エネルギー演算子, } \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right),$$

$E_{\text{tot}}$  を最小化するための Kohn-Sham 方程式が導出される。

$$H\psi_i(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}) \quad (4)$$

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + \mu_{\text{xc}}(\vec{r}) \quad (5)$$

$$V_H(\vec{r}) = e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' \quad (6)$$

$$\mu_{\text{xc}}(\vec{r}) = \delta E_{\text{xc}}[\rho]/\delta \rho \quad (7)$$

これは一電子波動関数のセット  $\{\psi_i(\vec{r})\}$  を決める方程式である。 $V_{\text{eff}}$  は、原子核(イオン)からのポテンシャル  $V$ 、電子からの静電ポテンシャル  $V_H$ 、複雑な多体相互作用を表す交換相関ポテンシャル  $\mu_{\text{xc}}$  の和である。 $\mu_{\text{xc}}$  は汎関数  $E_{\text{xc}}$  の関数微分で、それ自体も  $\rho$  の汎関数である。

この方程式は Lagrange の未定係数法から導出される。式(1)の汎関数  $E_{\text{tot}}$  は、式(2)から一電子波動関数のセット  $\{\psi_i\}$  の汎関数  $E_{\text{tot}}[\{\psi_i\}]$  と見なせる。 $\rho$  についての最小化を  $\{\psi_i\}$  の規格直交条件付きの最小化で実行する。そのために

$$\Omega_{\text{tot}}[\{\psi_i\}] = E_{\text{tot}}[\{\psi_i\}] - \sum_{ij} \lambda_{ij} (\langle \psi_i | \psi_j \rangle - \delta_{ij}) \quad (8)$$

の変分  $\delta\Omega_{\text{tot}}[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^* = 0$  を扱う (注:  $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \int \phi_i^*(\vec{r})\phi_j(\vec{r})d\vec{r}$ ). 直交化は別過程で付加するとすれば

$$\Omega_{\text{tot}}[\{\phi_i\}] = E_{\text{tot}}[\{\phi_i\}] - \sum_i \lambda_i (\langle\phi_i|\phi_i\rangle - 1) \quad (9)$$

で, 変分は  $\delta E_{\text{tot}}[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^* - \lambda_i \phi_i = 0$  である. 式(1)の汎関数微分  $\delta E_{\text{tot}}[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^*$  は, 第二項~第四項について  $\rho$  での微分を先に行い, 式(2), (3)から Kohn-Sham 方程式が導出される.

$$\begin{aligned} \delta E_{\text{tot}}[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^* &= \delta T[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^* + \delta \left\{ \int V(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^2}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' + E_{\text{xc}}[\rho] \right\} / \delta\rho \cdot \delta\rho / \delta\phi_i^* \\ &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \delta E_{\text{xc}}[\rho] / \delta\rho \right] \phi_i \\ &= H\phi_i \end{aligned} \quad (10)$$

式(2), (3)はスピンを区別して扱わないので2が係数についている. 式(10)にも係数2がつくかと思われるが, 一つのスピンの状態についての汎関数微分なので係数2は無くてもよい. ここで  $\delta E_{\text{tot}}[\{\phi_i\}]/\delta\phi_i^* = H\phi_i$  の関係は重要である(第7章で用いる). 式(1)の第五項  $E_{I-1}$  は  $\rho$  を含まないので Kohn-Sham 方程式には関わらない. なお,  $\phi_i^*$  でなく  $\phi_i$  についての汎関数微分を行っても,  $\phi_i^*$  についての同様の方程式になり同じである(第6章(5)節で扱う).

式(5)の  $V_{\text{eff}}$  は系の全電子に共通である. 静電ポテンシャル  $V_H$  は, 全電子からの寄与で, 各状態  $\phi_i$  の自分自身からの寄与(自己相互作用)も含むが,  $\mu_{\text{xc}}$  内の自己相互作用で打ち消される. 電子相関の強い系では, この点がうまくいかず精度を悪くする(文献(3)の第9章に詳しい). 一方, 電子スピンについて区別せずに扱ってきたが, スピン分極する系等では, up と down の各スピンの波動関数  $\phi_i^\sigma$  ( $\sigma = \uparrow$  or  $\downarrow$ ) で別々に Kohn-Sham 方程式が組み立てられ, 交換相関ポテンシャル  $\mu_{\text{xc}}$  が  $\mu_{\text{xc}}^\sigma$  でスピン毎に異なる.

式(4)はシュレディンガー方程式の形  $H\phi_i = E_i\phi_i$  をしており, 固有値  $E_i$ , 固有状態  $\phi_i$  を求める問題となる. 異なる固有状態の波動関数は互いに直交化している ( $\int \phi_i^*(\vec{r})\phi_j(\vec{r})d\vec{r} = \delta_{ij}$ ).  $V_{\text{eff}}$  は  $\rho$  の寄与 ( $\{\phi_i(\vec{r})\}$  の寄与) を含むので, 方程式は入力と出力の  $\rho(\vec{r})$  が一致するように解く. これを自己無撞着(self-consistent field; SCF)計算という. 最終解の  $\{\phi_i(\vec{r})\}$  からの  $\rho(\vec{r})$  が  $E_{\text{tot}}$  を最小にする基底状態の電子密度分布である.

ここで, 式(4)の両辺に左から  $\phi_i^*$  を作用させて積分し, 占有状態の和をとると, 右辺は  $2\sum_i^{\text{occ}} E_i$  となり(2はスピンの和), 左辺の各項は  $\rho$  や  $\phi_i^*$  をかけた積分となり, 式(1)との比較から次式が導出される.

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}}[\rho] &= 2 \sum_i^{\text{occ}} E_i - \frac{1}{2} \int V_H(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + E_{\text{xc}}[\rho] \\ &\quad - \int \mu_{\text{xc}}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + E_{I-1} \end{aligned} \quad (11)$$

右辺第二項は, 式(6)からの  $\int V_H(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r}$  が式(1)の第三項の2倍になっているためである.

ところで, 密度汎関数理論で厳密に正しいことが証明され

ているのは, 式(1)の全エネルギー汎関数  $E_{\text{tot}}$  を最小化する電子密度分布  $\rho$  が基底状態の正しい  $\rho$  と  $E_{\text{tot}}$  を与えるということだけである. 一電子波動関数のセット  $\{\phi_i\}$  は, (極論すれば)式(2)を通じて式(1)の最小化を実行する手段(パラメータ)である. Kohn-Sham 方程式の導出時に用いた運動エネルギーの一電子波動関数による表現式(3)も,  $T + E_{\text{xc}}$  に封じ込められた多体相互作用を扱う際の一つの選択である. つまり, Kohn-Sham 方程式の一電子波動関数  $\phi_i$  とその準位  $E_i$  の物理的な意味が明確でないという弱点がある. 一電子波動関数とその準位という概念自体がモデルであるためである. 固有値  $E_i$  は最高占有準位が, 系からその電子を取り去るエネルギーに対応することが知られているが, 他の準位の意味は明確でない. 固有値  $E_i$  は, 観測されるバンド構造(多電子系のスペクトル)を少なくとも定性的には再現する.

### (5) 局所密度近似と密度勾配近似

密度汎関数理論の最大の問題点は,  $\rho(\vec{r})$  の汎関数である交換相関エネルギー  $E_{\text{xc}}[\rho]$  とその汎関数微分である交換相関ポテンシャル  $\mu_{\text{xc}}[\rho]$  の厳密な形がわからないことである. 一方, 一様電子ガス(一様な正電荷バックグラウンド下の自由電子集団)については, 理論や数値解析から関数形がわかっている. そこで,  $\rho(\vec{r})$  の空間変動が小さいとして,  $\vec{r}$  毎にその地点の電子密度を一様電子ガスの表式に代入して用いる簡便法が局所密度近似(local density approximation; LDA)である<sup>(10)</sup>.  $\varepsilon_{\text{xc}}(\vec{r})$  を交換相関エネルギー密度として

$$E_{\text{xc}}[\rho] = \int \varepsilon_{\text{xc}}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \quad (12)$$

$$\mu_{\text{xc}}(\vec{r}) = \delta E_{\text{xc}}[\rho] / \delta\rho = \varepsilon_{\text{xc}}(\vec{r}) + \delta\varepsilon_{\text{xc}} / \delta\rho \cdot \rho(\vec{r}) \quad (13)$$

となり, 実空間メッシュ点  $\vec{r}_m$  毎に  $\rho(\vec{r}_m)$  の値から  $\varepsilon_{\text{xc}}(\vec{r}_m)$ ,  $\mu_{\text{xc}}(\vec{r}_m)$  の値を計算して与える.

実際には  $\rho(\vec{r})$  の空間変動は小さくない. そこで, 電子密度に加えて密度勾配  $\nabla\rho(\vec{r})$  (厳密には  $|\nabla\rho(\vec{r})|$ ) も取り入れて  $E_{\text{xc}}$ ,  $\mu_{\text{xc}}$  を表す一般化密度勾配近似(generalized gradient approximation; GGA)<sup>(11)(12)</sup>も提案されている.

局所密度近似を用いた計算は, 物質の凝集エネルギーを高め, ボンド長を短めに再現する傾向がある(実験値との誤差2~5%内外). 密度勾配近似ではかなり改善される. Feの最安定構造が強磁性のbcc構造であることも密度勾配近似で初めて再現される(文献(1)の第5章). しかし, 密度汎関数理論は基底状態を扱う理論であり, 励起状態に関わる物性値(光学的性質等)の精度は良くない(LDA, GGA共にバンドギャップ値は実験値の1/2~2/3). また, フォンデルワールス相互作用は動的な電子相関に起因し, 従来のLDA, GGAでは扱えなかったが, 最近, 密度汎関数理論の枠内で扱う手法が開発されている<sup>(13)</sup>. 一方, 強相関系といわれる物質群(例えばNiOなど)について, 密度汎関数理論では, 金属か非金属かなど基本的な電子状態の再現性も難しい場合がある. 密度汎関数理論の限界を超える理論や手法(量子モンテカルロ法等<sup>(14)</sup>)も研究されている.

### 3. 第一原理計算の基礎：周期的ポテンシャル場における固有値・固有関数

#### (1) 格子と逆格子

結晶やスーパーセルの周期系では格子点毎に同じ単位胞が繰り返す(図1). 格子点(単位胞)の位置を示す格子ベクトル  $\vec{R}$  は, 基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  を用いて  $\vec{R} = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$  ( $l_1, l_2, l_3$  は整数) である. 単位胞は,  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  を稜とする平行六面体を取ることができ, 原子位置は単位胞内相対位置ベクトル  $\vec{r}_a$  を用いて  $\vec{R} + \vec{r}_a$  である.

結晶やスーパーセルでは, 式(5)のポテンシャル  $V_{\text{eff}}(\vec{r})$  が格子周期性(並進対称性)を持ち, 任意の  $\vec{R}$  に対し

$$V_{\text{eff}}(\vec{r} + \vec{R}) = V_{\text{eff}}(\vec{r}) \quad (14)$$

となる. ポテンシャルは単位胞毎に同じものが繰り返す.

一方, 基本逆格子ベクトルが, 実空間の格子に対応して,

$$\vec{b}_1 = 2\pi\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 / \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3, \quad \vec{b}_2 = 2\pi\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 / \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3, \quad \vec{b}_3 = 2\pi\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 / \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \quad (15)$$

で定義され,  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  を満たす. 逆格子点(逆格子ベクトル)が  $\vec{G} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$  ( $m_1, m_2, m_3$  は整数) のように周期的に繰り返す逆格子空間( $\vec{k}$  空間)が設定できる. 格子ベクトルとの内積が

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi M \quad (M \text{ は整数}) \quad (16)$$

である. 実格子の単位胞に対応して, 逆格子空間の単位胞がブリルアンゾーン(Brillouin zone)である(図2).  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  を稜とする平行六面体でもよいが, 逆格子点を中心に近接する逆格子点へのベクトルの垂直二等分面で区切られた同じ体積の領域が取られる. 実空間の単位胞の体積は  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  による平行六面体の体積  $\Omega_c = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$  で, 逆格子空間のブリルアンゾーンの体積は  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  による平行六面体の体積  $|\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \times \vec{b}_3| = (2\pi)^3 \Omega_c^{-1}$  である. 単位胞の体積  $\Omega_c$  が大きいほどブリルアンゾーンの体積は小さくなる.

#### (2) ブロッチの定理, $\vec{k}$ 点, ブリルアンゾーン内積分

格子ベクトル  $\vec{R}$ , 逆格子ベクトル  $\vec{G}$  で特徴付けられる周期系(並進対称性のある系)において Kohn-Sham 方程式を解く計算が, バンド計算である. Kohn-Sham 方程式は2次の偏微分方程式(波動方程式)で, 解は波動の性質を持つ. ブロッチの定理(Bloch's theorem)から, 周期系の固有関数は, 以下の性質を持つ(厳密には群論を用いて証明される<sup>(15)(16)</sup>). 固有関数は, 必ず波数ベクトル  $\vec{k}$  を持つ波(進行方向  $\vec{k}$ , 波長  $2\pi/|\vec{k}|$ ) であり,  $\vec{k}$  はブリルアンゾーン内に限られる. さらに固有関数は以下の形を持つ(図3).

$$\phi_{\vec{k}n}(\vec{r}) = U_{\vec{k}n}(\vec{r}) \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}] \quad (17)$$

$U_{\vec{k}n}(\vec{r})$  は格子周期関数で, 任意の  $\vec{R}$  の並進について

$$U_{\vec{k}n}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{\vec{k}n}(\vec{r}) \quad (18)$$

を満たす.  $n$  はバンド指標である. 単位胞当たりの電子数に応じて  $\vec{k}$  点毎に数個の固有状態を求めるが, エネルギーの低い順に番号  $n$  を付ける. 式(17)から, 固有状態  $\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})$  の電子密度分布の式(2)への寄与  $|\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})|^2$  は,  $\exp$  項が消えて

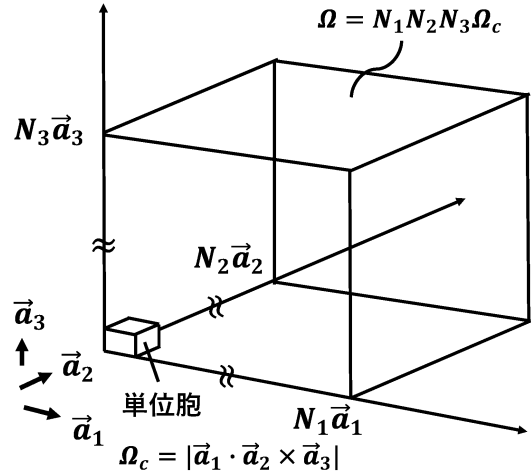


図1 結晶の単位胞の並びとボルン-フォンカルマンの周期境界条件. 単位胞(体積  $\Omega_c$ ) が基本並進ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  の周期で繰り返す. 一方, 三方向に  $N_1\vec{a}_1, N_2\vec{a}_2, N_3\vec{a}_3$  のサイズの体積  $\Omega$  の結晶部分が, さらに外側に繰り返すボルン-フォンカルマンの境界条件を考える.

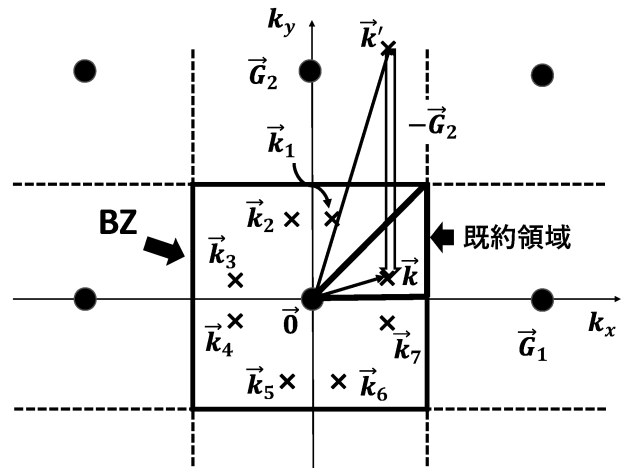


図2 ブリルアンゾーンと既約領域(正方晶の例). 黒丸が  $\vec{G}$  点. 図に垂直方向が  $k_z$  軸, ブリルアンゾーンは  $k_x - k_y$  面が正方形,  $k_z$  軸に沿って正と負の正四角柱.  $\vec{k}_1 \sim \vec{k}_7$  点は, 既約領域の  $\vec{k}$  点を系の対称操作で回転した  $S\vec{k}$  点. 既約領域は  $k_z$  が正の領域の三角柱(1/16の部分). 反転対称のある正方晶( $D_{4h}$  など)では対称要素は16個,  $S\vec{k}$  により既約領域がブリルアンゾーン全体を埋める. 反転対称のない場合( $C_{4v}$  など), 対称要素数は8個, 時間反転対称で  $-\vec{k}$  や  $-S\vec{k}$  も同じ固有値, 既約領域は同じ(1/16).

$|U_{\vec{k}n}(\vec{r})|^2$  であり, 式(18)から, その分布も格子周期関数である.

本稿でのブリルアンゾーンは, 原点を中心とした第一ブリルアンゾーンのことである. 図2に示すように, 第一ブリルアンゾーンから外に出た  $\vec{k}$  を持つ固有状態, 例えば, 理想的な自由電子として, 波動関数が  $\exp[i\vec{k}' \cdot \vec{r}]$  の電子状態を考えよう. 何らかの逆格子ベクトル  $\vec{G}$  で  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$  として,  $\vec{k}$  が第一ブリルアンゾーンに入るようにできる. 波動関数は  $\exp[i\vec{k}' \cdot \vec{r}] = \exp[i\vec{G} \cdot \vec{r}] \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}] = U_{\vec{G}}(\vec{r}) \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]$  で, 式

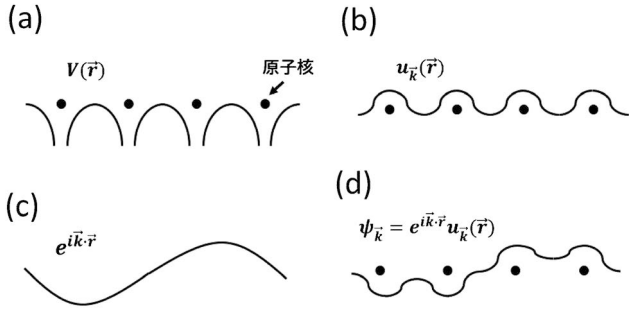


図3 結晶中の固有関数の概念図。(a)格子の周期ポテンシャル  $V(\vec{r})$ のもとでは、ブロッホの定理から、(b)格子周期関数  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ と(c)平面波  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ の積の形を(d)電子の固有関数  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ が有する。 $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ や  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ,  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ は複素数であるが、簡単のため実数成分のみを模式的に示す。

(17)のように第一ブリルアンゾーン内の  $\vec{k}$  の固有状態と見なせる。 $\exp[i\vec{k}\cdot\vec{r}]$ の状態より上のバンドの状態 ( $n > 1$ ) になる。

格子ベクトルから逆格子ベクトルやブリルアンゾーンを組み立てる理由は、周期系の電子の固有状態は  $\vec{k}$  で識別され、ブリルアンゾーン内の全  $\vec{k}$  点で固有値、固有関数を求めれば、電子構造が完全に解けたことになるからである。式(14), (17), (18)を式(4)と組み合わせると、周期系のKohn-Sham方程式は  $\vec{k}$  点に依存した形となり、 $\vec{k}$  点毎に固有値  $E_{\vec{k}n}$ 、固有関数  $\psi_{\vec{k}n}$  を求める。求まった  $E_{\vec{k}n}$ ,  $\psi_{\vec{k}n}$  は、バンド指標  $n$  を固定し  $\vec{k}$  を変化させると少しずつ変化し、 $\vec{k}$  についての連続関数とみなせる。ブリルアンゾーン内の連続な固有状態の一集団を「バンド」と呼ぶ(複数のバンドが重なる場合、 $n$  の値の入れ替わりがある)。ブリルアンゾーン内の  $\vec{k}$  に応じた  $E_{\vec{k}n}$  の変化の様子をバンド構造(バンド分散)という。

ブリルアンゾーン内には、稠密に  $\vec{k}$  点が存在する。周期系全体の単位胞(格子)の数  $N$  とブリルアンゾーン内の  $\vec{k}$  点の数は理念上、同じである。図1のマクロの周期境界条件(ボルン・フォンカルマン(Born-von Karman)の周期条件)で、単位胞が  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  方向に各々  $N_1\vec{a}_1, N_2\vec{a}_2, N_3\vec{a}_3$  のサイズで繰り返す体積  $\Omega = N\Omega_c$  ( $N = N_1N_2N_3$ ,  $N$  は巨視的な数)の結晶部分を考え、そこでの並進自由度の総数  $N$  に対応して  $\vec{k}$  点 が定義されるからである<sup>(16)</sup>。従って、ブリルアンゾーンは、バンド毎にスピン含めて  $2N$  の状態(電子)を収容する<sup>(16)</sup>。単位胞当たりでは2電子である。bcc-Na金属の価電子バンドを考えると、bcc単位胞に1原子、価電子1個なので、bccのブリルアンゾーンは半分だけ埋まる。Diamond構造のSiは、単位胞2原子、価電子が8個、diamond構造のブリルアンゾーンでは、重なった4バンド分が全て埋まる。単位胞当たり2電子が常に一つのバンド(ブリルアンゾーン全体)を埋める(スピン分極した場合は1電子が1バンド)。

さて、式(2), (3), (11)などの占有状態についての和は、ブリルアンゾーン内の  $\vec{k}$  点の占有部分の積分になる。実際には、メッシュ点など離散的な  $\vec{k}$  点で  $E_{\vec{k}n}, \psi_{\vec{k}n}$  を求め、そ

れらの和として実行する。例えば、式(2)の電子密度分布は、

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \sum_n^{\text{occ}} 2 \frac{\Omega_c}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} f_{\vec{k}n} |\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})|^2 d\vec{k} = \sum_n^{\text{occ}} \sum_{\vec{k}_i} w_{\vec{k}_i n} |\phi_{\vec{k}_i n}(\vec{r})|^2 \\ &= \sum_n^{\text{occ}} \sum_{\vec{k}_i} w_{\vec{k}_i n} |U_{\vec{k}_i n}(\vec{r})|^2 \end{aligned} \quad (19)$$

で与えられる。一行目の表現は占有されたバンド毎のブリルアンゾーン(BZ)内の占有状態部分の積分で、2はスピン、 $\Omega_c/(2\pi)^3$  はブリルアンゾーン体積で割る規格化因子、 $f_{\vec{k}n}$  はバンド毎の  $\vec{k}$  点について占有部分で1、非占有で0に取る。金属の場合、同じ  $n$  でもブリルアンゾーン内で  $\vec{k}$  点によって、占有状態と非占有状態があり得る。式(19)の一行目の右側と二行目は、ブリルアンゾーン内積分をメッシュの  $\vec{k}_i$  点の値の重み付きの和で実行する。スピンや占有、非占有を含めて、重み  $w_{\vec{k}_i n}$  で調整する。

積分の精度と効率の観点から、ブリルアンゾーン内の  $\vec{k}$  点のサンプル法、メッシュ法が提案されている<sup>(17)</sup>。金属の場合、フェルミ面近傍の占有部分と非占有部分の区別のため、細かな  $\vec{k}$  点メッシュ点が必要になる。限られた  $\vec{k}$  点数で積分精度を上げる方法として、フェルミ面付近で Gaussian 等でボカした占有率を導入する方法等がある<sup>(18)(19)</sup>。

### (3) 系の対称性とブリルアンゾーンの既約領域

メッシュの  $\vec{k}$  点を抽出する領域は、ブリルアンゾーン全域ではなく、時間反転対称性と結晶系の持つ対称要素  $\{S|\vec{t}_S\}$  から、既約領域(irreducible part)に絞ることができる<sup>(15)</sup>(図2)。既約領域の  $\vec{k}$  点について固有値、固有関数を求めれば、 $S\vec{k}$  や  $-\vec{k}$  の固有値や固有関数との関係から、ブリルアンゾーン全体から  $\vec{k}$  点を抽出したことになるのである。

既約領域とは、その領域の  $\vec{k}$  点を、系の全ての対称要素の回転行列  $S$  で回転した  $S\vec{k}$  で、ブリルアンゾーンの全体(反転対称性を持つ系)または半分(反転対称性を持たない系)が埋め尽くせる領域である。例えば、対称要素が48個ある diamond 構造では、既約領域はブリルアンゾーン全体の1/48の部分である。反転対称のない zinc-blende 構造では、対称要素は24個だが、既約領域は同じく1/48である。

まず、時間反転対称から、 $-\vec{k}$  の固有値  $E_{-\vec{k}n}$  は  $\vec{k}$  の固有値  $E_{\vec{k}n}$  と同じ値で、固有関数(波動関数)も互いに複素共役の関係がある<sup>(15)</sup>。従って、必要な領域は、ブリルアンゾーンの半分に絞られる。上記の diamond 構造と zinc-blende 構造の比較で、反転対称のない系でも反転対称のある系と同じ既約領域になる理由は、この時間反転対称の効果である(ただし、スピンが関わると成り立たない場合もある)。

次に対称要素の効果を考える。 $\{S|\vec{t}_S\}$  は、行列  $S$  で回転(鏡映含む)した後、 $\vec{t}_S$  の並進を施す操作( $\vec{t}_S$  は基本並進ベクトルより小さい並進で「らせん」「映進」の場合にのみ存在)である<sup>(15)</sup>。結晶が  $\{S|\vec{t}_S\}$  を対称要素として持つ(その操作で結晶が不変)なら、 $S\vec{k}$  での固有値が  $\vec{k}$  での固有値と同じ値で、 $S\vec{k}$  での固有関数は  $\vec{k}$  の固有関数を  $\{S|\vec{t}_S\}$  で移したものになる。



この証明は以下である．実空間での対称操作は  $\vec{r}' = \{S|\vec{t}_S\}\vec{r} = S\vec{r} + \vec{t}_S$  である．関数  $f(\vec{r})$  に作用させると，括弧内の  $\vec{r}$  には逆変換で

$$\{S|\vec{t}_S\}f(\vec{r}) = f(\{S|\vec{t}_S\}^{-1}\vec{r}) = f(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S)) \quad (20)$$

と表される． $\vec{k}$  での固有値，固有関数の Kohn-Sham 方程式の両辺に対称操作を作用させると

$$\begin{aligned} \{S|\vec{t}_S\}H\phi_{\vec{k}n} &= \{S|\vec{t}_S\}E_{\vec{k}n}\phi_{\vec{k}n}, \\ H\{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n} &= E_{\vec{k}n}\{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n} \end{aligned} \quad (21)$$

となる．ハミルトニアンと対称操作が可換であるためである．これから，波動関数  $\{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n}$  は， $\vec{k}$  の固有状態  $\phi_{\vec{k}n}$  と同じ固有エネルギー  $E_{\vec{k}n}$  を持つ固有状態であると言える．

一方， $\{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n}$  は，式(20)と式(17)を用いて

$$\begin{aligned} \{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n}(\vec{r}) &= \{S|\vec{t}_S\}U_{\vec{k}n}(\vec{r})\exp[i\vec{k}\cdot\vec{r}] \\ &= U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S))\exp[i\vec{k}\cdot S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S)] \\ &= \exp[-iS\vec{k}\cdot\vec{t}_S]U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S))\exp[iS\vec{k}\cdot\vec{r}] \end{aligned} \quad (22)$$

となる．内積の関係式  $\vec{k}\cdot S^{-1}\vec{r} = S\vec{k}\cdot\vec{r}$  を用いている．式(22)の  $\exp[-iS\vec{k}\cdot\vec{t}_S]U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S))$  の部分について， $\exp[-iS\vec{k}\cdot\vec{t}_S]$  は定数なので無視し，残りの部分は

$$\begin{aligned} U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} + \vec{R} - \vec{t}_S)) &= U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S) + S^{-1}\vec{R}) \\ &= U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S) + \vec{R}') = U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S)) \end{aligned} \quad (23)$$

となり， $\exp[-iS\vec{k}\cdot\vec{t}_S]U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S))$  が格子周期関数と言える． $\vec{R}' = S^{-1}\vec{R}$  が同じ格子の格子ベクトルであること(回転  $S$  や  $S^{-1}$  で同じ格子系に移る)， $U_{\vec{k}n}(\vec{r})$  が格子周期関数であることを使っている．こうして， $\{S|\vec{t}_S\}\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})$  はブロッホの定理を満たす  $S\vec{k}$  の固有状態  $\phi_{S\vec{k}n}(\vec{r})$  と言える(複素数の位相の不定性はある)．

なお，系の対称要素  $\{S|\vec{t}_S\}$  について， $\vec{k}$  と  $S\vec{k}$  の関係には並進成分  $\vec{t}_S$  は関わらない．また，上記で出てきた格子ベクトルの対称操作にも  $\vec{t}_S$  は直接には関わらない．内部座標  $\vec{t}_a$

が関わる原子位置  $\vec{R}_a = \vec{R} + \vec{t}_a$  について， $\vec{R}'_a = \{S|\vec{t}_S\}\vec{R}_a = S\vec{R} + (S\vec{t}_a + \vec{t}_S) = \vec{R}' + \vec{t}'_a$  のように，原子座標の調整にのみ  $\vec{t}_S$  が関わる．

以上のように， $\vec{k}$  での固有値  $E_{\vec{k}n}$ ，固有関数  $\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})$  が求まれば， $S\vec{k}$  での固有値は同じ値で， $S\vec{k}$  での固有関数は， $\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})$  を実空間で対称操作したものになる． $\vec{k}$  と  $S\vec{k}$  の固有関数のノルムの二乗(電子密度)の分布は，式(22)から  $|U_{\vec{k}n}(\vec{r})|^2$  と  $|U_{\vec{k}n}(S^{-1}(\vec{r} - \vec{t}_S))|^2$  で，後者は前者を実空間で  $\{S|\vec{t}_S\}$  の操作で移したもの． $\phi_{S\vec{k}n}(\vec{r})$  を求めなくても， $\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})$  の電子分布の対称操作でその寄与を得ることができる．なお，対称性(空間群)の議論は文献(15)を参照のこと．

#### (4) 第一原理計算の手順

第一原理計算は，以下のような手順となる(図4)．

- ①実格子から逆格子，ブリルアンゾーンを組み立て，規約領域と  $\vec{k}$  点メッシュ，各種計算条件を決定する．
- ②単位胞内初期原子座標の設定，初期の input の電子密度分布  $\rho_{in}(\vec{r})$  の設定(自由原子の電子密度分布の重ね合わせ等)．
- ③原子配列と  $\rho_{in}(\vec{r})$  を式(4)~(7)に入れて，ポテンシャル  $V_{eff}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + \mu_{xc}(\vec{r})$ ，ハミルトニアンを組み立てる． $\vec{k}$  点毎に Kohn-Sham 方程式を解き，固有値  $E_{\vec{k}n}$ ，固有関数  $\phi_{\vec{k}n}$  を求める(この部分の詳細は次章以降で論じる)．
- ④求めた全  $\vec{k}$  点の全固有状態をエネルギーの低い順に並べ，フェルミ準位を決める．各状態の占有率を決める．
- ⑤占有された固有関数の電子密度分布  $|\phi_{\vec{k}n}(\vec{r})|^2$  のブリルアンゾーン内積分から，output の電子密度分布  $\rho_{out}(\vec{r})$  を計算．
- ⑥  $\rho_{in}(\vec{r})$  と  $\rho_{out}(\vec{r})$  を比較，前回の  $\rho_{in}(\vec{r})$  に  $\rho_{out}(\vec{r})$  との差の成分を加え(charge-mixing)，次回の  $\rho_{in}(\vec{r})$  を構築し，③に戻る．

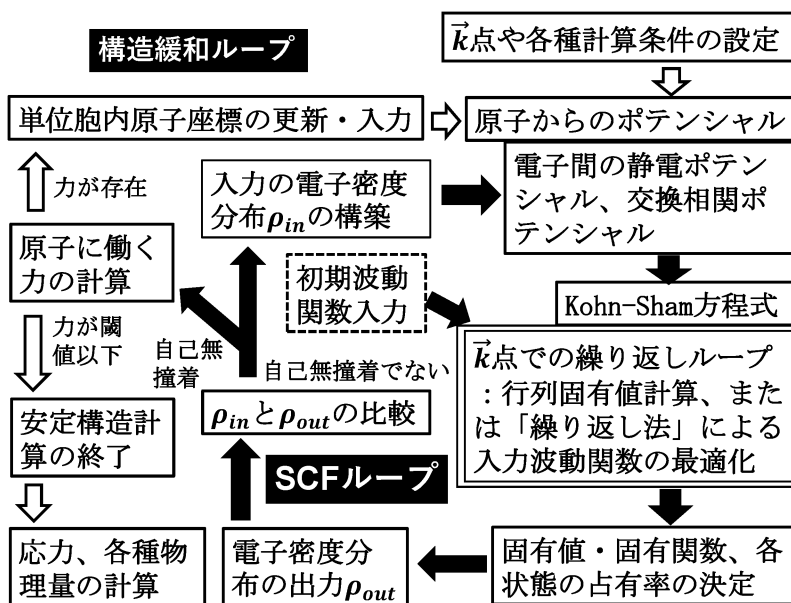


図4 第一原理計算の手順．SCF ループと構造緩和ループ．右下の二重四角部分が狭義のバンド計算で，Kohn-Sham 方程式の固有値・固有関数を  $\vec{k}$  点毎に求める．最近のアルゴリズムでは，入力した初期波動関数(破線の四角部分)の繰り返し法による最適化計算として解く．

⑦以上の過程を  $\rho_{in}(\vec{r})$  と  $\rho_{out}(\vec{r})$  が一致するまで繰り返す (SCF ループ). 収束条件は, 例えば, 単位胞内全メッシュ点  $\vec{r}_m$  で

$$|\rho_{out}(\vec{r}_m) - \rho_{in}(\vec{r}_m)| \leq \Delta \quad (24)$$

のように入出力差が閾値  $\Delta$  以下になること. 実空間メッシュについては後述 (第 6 章(3)節).

簡単な charge-mixing 法としては, 例えば

$$\rho_{in}^{N+1}(\vec{r}_m) = \rho_{in}^N(\vec{r}_m) + \alpha(\rho_{out}^N(\vec{r}_m) - \rho_{in}^N(\vec{r}_m)) \quad (25)$$

のように, 次回の  $\rho_{in}^{N+1}$  を前回の  $\rho_{in}^N$  に入出力差の  $\alpha$  倍 ( $\alpha < 1$ ) を  $\vec{r}_m$  毎に加え作成する. 金属では振動が起きやすいので  $\alpha$  を小さくする. 後述 (第 7 章) のように  $\rho$  のフーリエ成分を扱ったり, 振動を防ぐ工夫が提案されている<sup>(20)</sup>.

SCF 計算で  $\{\psi_{\vec{k}n}(\vec{r})\}$  と  $\rho(\vec{r})$  が求まれば, 式 (1) から全エネルギーが決まる. 原子に働く力 (第 6 章(5)節) や応力<sup>(21)</sup> が計算できる. 力に従って原子変位を与える過程を繰り返せば安定原子配列が求まる. 応力に従って格子ベクトルを変えて計算を繰り返せば, 格子定数や単位胞 (格子) の形が最適化できる.

#### (5) バンド構造図と状態密度

バンド構造図や状態密度の計算は, SCF 計算が終了した後, 確定した  $\rho(\vec{r})$  による  $V_{eff}(\vec{r})$  のもと, 様々な  $\vec{k}$  点についての Kohn-Sham 方程式の固有値計算で行う.  $\vec{k}$  点は SCF 計算で用いた  $\vec{k}$  点とは異なる. バンド構造図では, 特別の対称性を持つブリルアンゾーン内のエッジや頂点の  $\vec{k}$  点で計算され,  $E_{\vec{k}n}$  の変化の様子 (バンドの分散) を探る. 状態密度は, 既約領域内の緻密な均一メッシュの  $\vec{k}$  点で固有値計算を行い, エネルギー軸でのヒストグラム (各エネルギー刻みに存在する固有状態の数) から求める. 内挿補間から連続曲線の状態密度を求める方法もある (四面体 (tetrahedron) 法<sup>(22)</sup>).

### 文 献

- (1) 金森順次郎, 米沢富美子, 川村 清, 寺倉清之: 固体-構造と物性, 岩波書店, (1994).
- (2) 小口多美夫: バンド理論, 内田老鶴圃, (1999).
- (3) 藤原毅夫: 固体電子構造論, 内田老鶴圃, (2015).

- (4) R.M. マーチン: 物質の電子状態 (上, 下), 丸善出版, (2012).
- (5) S. Ogata, Y. Umeno and M. Kohyama: Model. Simul. Mater. Sci. Eng., **17**(2009), 013001(1-33).
- (6) J. Pokluda, M. Cerny, M. Šob and Y. Umeno: Prog. Mater. Sci., **73**(2015), 127-158.
- (7) R. F. Zhang, S. H. Zhang, Y. Q. Guo, Z. H. Fu, D. Legut, T. C. Germann and S. Veprek: Phys. Rep., **826**(2019), 1-49.
- (8) P. Hohenberg and W. Kohn: Phys. Rev., **136**(1964), B864-B871.
- (9) W. Kohn and L. S. Sham: Phys. Rev., **140**(1965), A1133-A1138.
- (10) J. P. Perdew and A. Zunger: Phys. Rev. B, **23**(1981), 5048-5079.
- (11) J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof: Phys. Rev. Lett., **77**(1996), 3865-3868.
- (12) J. A. While and D. M. Bird: Phys. Rev. B, **50**(1994), 4954-4957.
- (13) I. Hamada: Phys. Rev. B, **89**(2014), 121103(1-4).
- (14) W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs and G. Rajagopal: Rev. Mod. Phys., **73**(2001), 33-83.
- (15) G. パーンズ: 物性物理学のための群論入門, 培風館, (1983).
- (16) 香山正憲: まてりあ, **60**(2021), 717-721.
- (17) H. J. Monkhorst and J. D. Pack: Phys. Rev. B, **13**(1976), 5188-5192.
- (18) C.-L. Fu and K.-M. Ho: Phys. Rev. B, **28**(1983), 5480-5486.
- (19) M. Mathfessel and T. Paxton: Phys. Rev. B, **40**(1989), 3616-3621.
- (20) G. P. Kerker: Phys. Rev. B, **23**(1981), 3082-3084.
- (21) O. H. Nielsen and R. M. Martin: Phys. Rev. B, **32**(1985), 3780-3791.
- (22) G. Lehmann and M. Taut: Phys. Stat. Sol. B, **54**(1972), 469-477.

(次号へつづく)



香山正憲

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
 1985年 東京大学大学院工学系研究科 (金属材料学専攻) 博士課程中退  
 同年 工業技術院 大阪工業技術試験所 (現産業技術総合研究所関西センター) 入所  
 2004年 産業技術総合研究所 コビキタスエネルギー研究部門 グループ長  
 2015年 産業技術総合研究所 エネルギー・環境領域電池技術研究部門 首席研究員  
 2021年〜現職  
 専門: 計算材料科学, 粒界・界面・ナノ構造の材料科学, 新規手法・コードの開発  
 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 誌 Editorial Board member  
 E-mail: m-kohyama@aist.go.jp  
 ★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

# 先達からのお便り

## 縁は研究を結ぶ

東京工業大学名誉教授 里 達雄

長く勤めた東京工業大学を2015年3月に定年退職しました。学生の教育指導はもとより研究活動、大学の運営業務などに携わり、多くの人達と様々な交流の機会を得、経験をしてきました。本欄への寄稿の依頼を受け、ささやかながら思うところを記してみたいと思います。「先達」として若い皆様に何か申し上げるほどのことは特には持ち合わせていませんが、自分がこれまで実験などを通して経験したことを振り返り、いくらかでもご参考になれば幸いと思ひ筆を進めることにします。

1973年4月に学部4年の卒研生として金属工学科の非鉄金属材料学講座に配属されました。卒研テーマとして与えられたのが「アルミニウム合金の時効析出」でした。与えられたというよりは配属された同期4名によるくじ引きの結果で決まったテーマでした。これが私の長い研究生生活の主要テーマになることなど思いもしませんでした。アルミニウム合金の「GPゾーン」ということばを授業で確かに聞いた気はしたもののそれが何であるのか、また、一体何をすればいいのかなど皆目理解しておらず、言い知れぬ不安にかられたスタートだったことを今でも鮮明に覚えています。

当時、直接ご指導いただいた小島陽先生(元長岡技術科学大学学長)には、「ともかく、手足を動かして実験データを出してみなさい」と言われ、理解もないままにAl-Cu合金の溶解鑄造、圧延、線引き加工などを行って試料を作り、時効処理を行って測定データを取り始めました。手書きのグラフ用紙に硬さや電気比抵抗をプロットしていきましたがプロット数が増えるにつれて興味が徐々に沸いてきました。驚きがあったのです。Al-Cu合金にほんのわずかに(0.01~0.05 mass%) Snを添加すると硬さや電気比抵抗変化が大きく変わることに驚いたのです。今も強烈に印象に残っているのがそのとき得た図1のグラフです。図1(a)はAl-4%Cu (mass%)合金とAl-4%Cu-0.05%Sn合金を高温から水に焼入れたあと一定速度で昇温したときの硬さの変化です。試料を多数用意し、昇温しながら所定の温度になったときに試料を電気炉から素早く取り出して水冷し、硬さを測ったものです。微量のSnで硬化挙動が大きく異なります。また、図1(b)はAl-4%Cu合金にSnをほんの微量入れた合金を0°Cで保持したときの電気比抵抗変化です。微量のSnで電気比抵抗変化は大きく遅れます。「なぜ、Snがほんの微量入っただけでこんなに違うのだろうか?」、「そもそも、Al-4 mass% Cuというのは約2 at% Cuであり、Al原子が98個でCu原子がたったの2個だけなのに、時間とともに硬さが大きく変

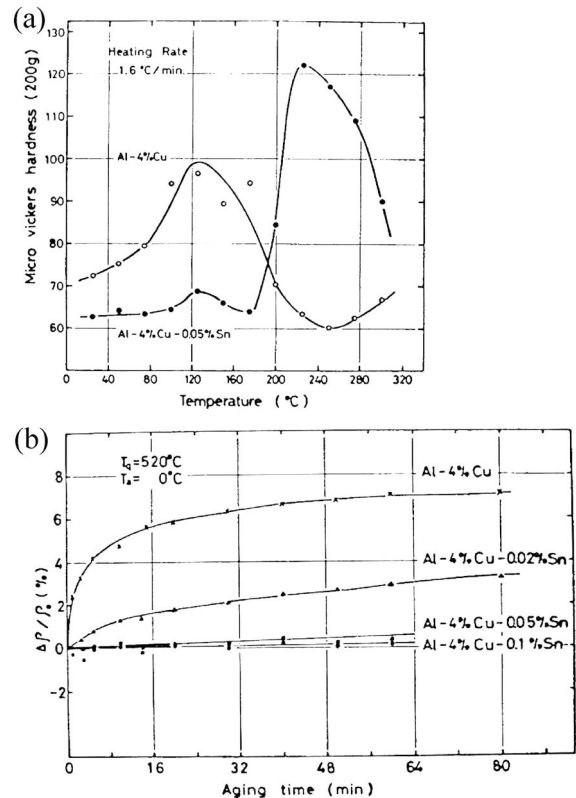


図1 Al-4%CuおよびAl-4%Cu-x%Sn (x: 0.02~0.1)合金の時効による硬さおよび電気比抵抗変化(卒論図面)。(a)昇温時効での硬さ変化、(b)0°C時効での電気比抵抗変化

化したり、電気比抵抗が変化するのはなぜか?という素朴な疑問が沸いてきました。私は鹿児島県の離島の徳之島で高校まで過ごしました。何もない島ですが、海や山や川はいつもそこにあり、子どもの頃は時間を忘れて仲間と遊びまわっていました。遊びの中で子どもにとって不思議なことに多く出会い、「なぜ?」、「どうして?」と始終自問していたときの気持ちが突如沸いてきました。島のことば(シマゴト)では、「スナティガヤ?」となります。このデータは研究生生活の原点ともいべき大きな驚きを与えてくれました。

当時、国内外の研究者が精力的に時効に関する実験を行い、論文などが次々に発表されていました。時間に伴う変化は時効(aging)とよばれ、この変化はGPゾーンが形成されるためだと説明されていました。GPゾーンとは Guinier-Preston Zone のことであり、二人の発見者の名前が付いていることを知りました。「では、GPゾーンとは何か?」、「なぜできるのか?」など、次々に疑問が沸き、論文を読んだり、学会で聴講するなどして自分の疑問の答えを見つけようとしていました。硬さや電気比抵抗に加えX線で調べる必要性を感じ、まずは単結晶づくりに取り組みました。研究室の先輩に「ひずみ焼鈍法」というのを教わり、Al-Cu合金の短冊状板材を使って何十枚もトライし、目指す結晶方位の粗大結晶粒づくりに挑戦しました。一晩かけて結晶を成長させるのです。大きめの結晶粒を選び出してはX線ラウエ法

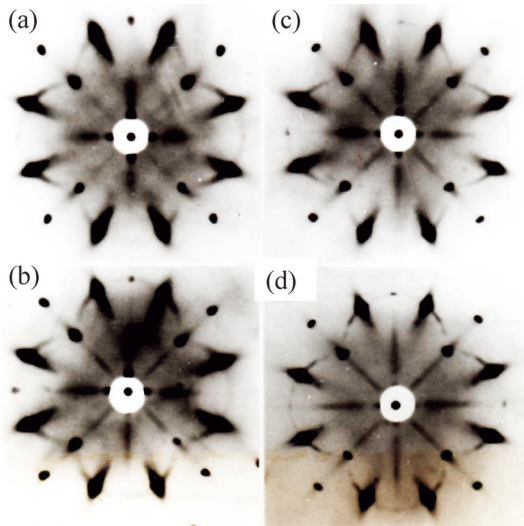


図2 Al-4%CuおよびAl-4%Cu-0.03%Sn合金の140°C時効試料のX線ラウエ写真(卒論図面)。(a),(b): Al-4%Cu, (c),(d): Al-4%Cu-0.03%Sn。(a),(c): 1.5 h, (b),(d): 24 h(オンラインカラー)

を用いて板面が(100)面に近い方位を選び出す作業です。ラウエ写真を見てもなかなか思うようには見つかりませんでした。そのうち先輩とのディスカッションで、試料をエッチングしてその光り具合、すなわち、試料を傾けたときの輝く角度具合から(100)面の当たりがつくことを見出し、その技で(100)面方位の単結晶をいくつも選び出すことができました。これらの単結晶を使って時効処理した試料のX線ラウエ写真を何枚も撮影しました。図2に例を示します。今ではほとんど行われませんが、当時はこの方法で時効析出の進行過程を調べていました。基本反射点から伸びるストリークの強さや形から時効過程を判断していました。当時、研究室ではこの単結晶選びは自慢の「技」でした。後になって単結晶はX線ラウエ写真のほかにX線小角散乱測定にも活用し、様々なデータを得ることができました。ただし、GPゾーンの実際の姿はまだわかりませんでした。

この頃、指導教官(当時は「教官」とよばれていた)の高橋恒夫先生が名古屋大学の美浜和弘先生を紹介して下さいました。美浜先生は透過電顕の専門家、高橋先生とは東工大で同じ研究室だったとのご縁です。美浜先生の研究室には当時加速電圧100 kVの高分解能電顕があり、これでGPゾーンを高倍率で直接観察してみようと計画を立てました。この電顕には試料傾斜装置が付いていないとのことで、試料の(100)面を観察するには(100)面の薄膜試料を用意する必要がありました。このとき役立ったのが先ほどの面方位鑑識の技でした。研究室で時効した(100)面方位の試料から自作の電解研磨装置で慎重に薄膜をつくり、翌日名古屋大学まで持って行き観察しました。GPゾーンの結晶格子像がくっきりと観察できた感動は今も心に残っています。薄膜試料を壊さないように気にしながら何度も新幹線で名古屋に通いました。その数年後に研究室に加速電圧200 kVの高分解能電顕

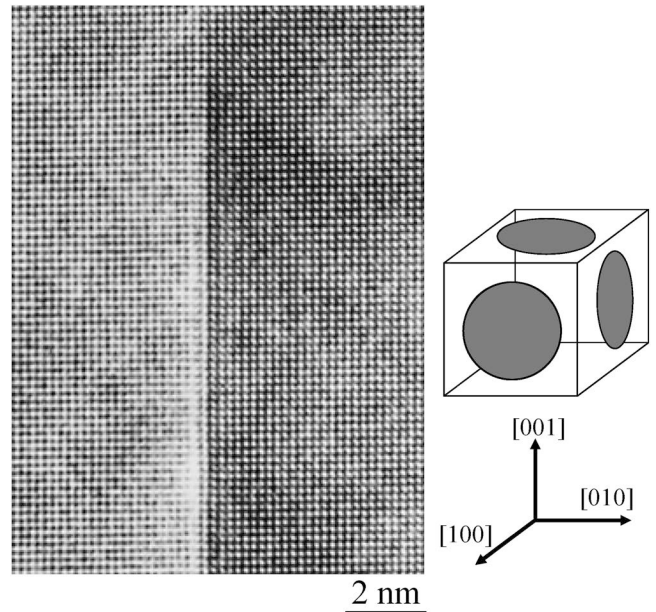


図3 Al-4%Cu合金のGP(1)ゾーンの高分解能電顕写真(150°C, 24 h). 母相の(100)面上に円板状にCu原子が集合.

が導入され、自由に観察できるようになりました。とはいえ、電顕はトップエントリー型の試料ステージで試料の挿入・取り出しや傾斜操作には細心の注意が必要でした。また、部屋の関係で電顕は建物の4階に設置されており、廊下を歩く人の振動が伝わるため真夜中に撮影していました。図3の高分解能写真は「真夜中に出会ったGPゾーン」の一例です。Alの(100)面にCu原子が板状に集まっている姿を観察できましたが、Cu原子の層は1枚だけでなく複数の層をもつものも観察され、GPゾーンの実際の姿は複雑であることもこのとき分かりました。フィラメントの交換、電子銃や試料室のクリーニングなどは自分で行っていましたので電顕の構造を肌で感じることができました。

もう一つ忘れられない研究室の装置は熱分析装置です。普通にある示差走査型熱分析装置(DSC)ではなく、断熱型比熱測定装置でした。試料室は外部からの熱の出入りがないように断熱型構造に工夫され、試料に常に一定の熱量が供給され一定間隔の温度上昇に要する時間を計測して比熱変化を求める方式です。試料から発熱があれば時間は短くなり、吸熱があれば長くなります。この装置によりごく初期のGPゾーンの形成・消滅挙動を明瞭に捉えることができました。試料室を液体窒素で冷却できる工夫もさらに加え、0°C以下の低温から測定できるようにしました。Al-Mg-Si合金の微小な溶質クラスターの形成を初めて捉えたのもこの装置でした。熱分析を用いた時効の研究は当時東北大学におられた平野賢一先生が精力的に行っておられました。平野先生は東工大のご出身とのご縁で親しく議論をいただいたり、アドバイスをいただいたりして多くの刺激を受けました。

話しは前後しますが、外部の大型装置での実験もGPゾーンの研究に大変有用でした。1980年代後半につくば市の高



エネ研(現 高エネルギー加速器研究機構, KEK)の放射光実験施設(PF)でビームラインを用いたX線小角散乱強度のその場連続測定(時分割測定)を行いました。Al-Cu合金の単結晶試料を用いて研究室から持ち運んだ小型電気炉内で時効処理し, ごく初期過程を連続的に調べました。これによりGPゾーン形成初期における形状変化や電気比抵抗変化との対応を定量的に結びつけることができました。特に, 低温時効のごく初期段階から形状の異方性が見出され, (100)面上にCu原子が集合することを明らかにできました。マシンタイムが3日ほどだったので, 睡眠時間を極力けずって実験を行いました。高エネ研のスタッフをはじめ研究仲間の協力を得て実施できた実験でした。

もう一つの大型装置での実験として東海村の日本原子力研究所(現 日本原子力研究開発機構)にあった中性子回折装置を使ったAl-Mg合金のGPゾーンの測定があります。AlとMgは原子番号が隣接しているためX線では十分なコントラストがつかず測定が難しかったのですが, 中性子回折装置では明瞭なコントラストを得ることができました。この測定によりAl-Mg合金の室温時効でL1<sub>2</sub>型規則構造のGPゾーンが形成されることを明らかにできました。これらの大型装置での実験はいずれも人の縁が結び付けてくれたお陰で実施できたものです。

振り返ってみると, 人の縁の繋がりで様々な研究を進めることができたと思っています。時効析出の研究グループに参加できたのも貴重な縁でした。1980年代初頭に, 当時京都大学におられた村上陽太郎先生が代表となり, アルミニウム合金の時効に関する研究グループができました。私は助手になりたてでしたがグループに加えていただきました。研究グループには時効析出に関わる著名な先生方が参加しておられました。京都大学からは村上先生の他に高村仁一先生, 長村光造先生, 東京大学からは鈴木寿先生, 菅野幹宏先生, 東北大学からは平野賢一先生, そして東工大からは高橋恒夫先生が参加しておられました。また, 米国のノースウエスタン大学のJ. B. Cohen先生も参加されており, それぞれ異なる視点から時効の研究を進めておられ, 最新の実験結果を相互に発表し, ディスカッションしていました。時効研究に対する刺激を受けたのみでなく, 研究に対する姿勢や心構えなども多く教わりました。研究グループで連名の論文も発表しました。多くの先生方が今は鬼籍に入られました but 忘れられない経験であり, 自分の研究生活を鼓舞していただきました。

受けた刺激といえば, 海外での国際会議参加でも忘れぬ経験が多くしました。初めて海外で発表したのは1987年に米国のデンバーで行われた「GPゾーンに関する国際シンポジウム」でした。GPゾーンに関する著名な研究者と直接会う機会となり, また, 初めての米国ということもあり夢のような時間でした。ただ, 自分の力不足を思い知る機会ともなりました。また, 1986年から始まったアルミニウム合金国際会議(ICAA)でも参加のたびに刺激を受け, 研究のヒントを得, さらに交流の実を広げることができました。特に, 仏国のグルノーブルではGPゾーンの発見者の一人である

A. Guinier先生に直接会って話を聞くことができました(1996年)。英国のケンブリッジではAl-Cu合金の時効硬化の研究で知られるJ. M. Silcock先生にも会い, 直接話をする機会となりました(2002年)。論文を読んだだけでは得られない経験となり, 研究へのモチベーションが高まりました。

1988年から1989年にかけて英国のマンチェスター大学に留学しました。ちょうど日本の元号が昭和から平成に変わった年です。マンチェスター大学のMaterials Science Centreの客員研究員として滞在しました。G. W. Lorimer先生の研究室に滞在し, 主に分析電顕を用いて合金中の微細析出物の組成分析の研究を行いました。Lorimer先生は時効の研究でもよく知られており, 無析出帯(PFZ)形成機構に関するLorimer-Nicholsonモデルを提唱しています。Lorimer先生とG. Cliff先生は電顕による組成分析の基礎を築かれており, アルミニウム合金中の析出物の電顕による分析手法を手取り足取り教えていただきました。Cliff-Lorimer factor (k-factor)の意味や決定方法, 合金の母相中に埋もれている析出物の分析手法(Cliff-Lorimer plot)などを学びました。これらの技法はその後の研究に大いに役立っています。図4はマンチェスター大学本館とLorimer先生, Cliff先生の写真です。マンチェスター大学に滞在中に印象に残ったことがあります。それは午前10時と午後3時に皆が仕事の手を休め, お茶(紅茶, コーヒーなど)を飲みに来る部屋があったことです。教職員や学生たちが三々五々集まってきて誰もが分け隔てなく談笑するのです。Common Roomとよばれたゆったりとした部屋でした。分野の異なる先生方, 著名な研究者, 学生たちが気さくに声を掛け合い, たわいのない話から専門の話, さらに装置の話など話題は何でもありでした。この部屋で新たな知遇を得たり, 研究の相談をしたり, 異分野の研究者から斬新なヒントを得たり, などが日々できる部屋でした。中には一人でコーヒーを飲みながら考えを巡らせたり, 一息入れる人もいます。このCommon



図4 マンチェスター大学(英国)およびLorimer先生, Cliff先生。(a)マンチェスター大学本館建物(スケッチ), (b) Lorimer先生, 奥様(マンチェスター大学の結晶学の教授)と息子さん, (c) Cliff先生と高精度分析電顕(VG-STEM)(オンラインカラー)

Room で私もいろいろな人と知り合いになり、自分の研究のことを話したり、相手の研究の面白い点などを多く教えてもらいました。マンチェスターの美味しいレストランやお勧めのパブなども教えてもらいました。豊かで濃密な時間を過ごすことができ、強く印象に残っています。

大学を定年退職後は素材メーカーの顧問として企業の皆さんと一緒に研究開発の議論をしています。ここで感じることもあります。それは、企業の現場で直面する諸課題やユーザー企業からのニーズへの対応において、大学で行っていた基礎研究や経験が大いに役立つとの実感です。産学の連携が常に謳われますが、課題やテーマは共通性が意外と高いと感じています。その意味では大学等での基礎研究をしっかりと深め展開するとともに、大学等と企業の双方が目を向けあっていたら研究上の協力・連携のハードルは意外と低いはずだと実感しています。現役の頃を思い出すと、研究室で定期的に行う輪講はきわめて有意義なものだったと思います。様々な研究テーマについて輪番で発表を行い、その内容をもとにディスカッションするもので、分かりやすいプレゼンの仕方や質疑応答の仕方などを習得するのはもちろんですが自分の誤解や考え不足に気がつき、さらには研究の新たなヒントが生まれてきます。東工大の材料工学専攻では輪講に他の研究室の学生の発表も組み込まれ、多岐にわたるテーマに接することができました。発表を単に無難に終えるのではなく、ディスカッションを通してむしろ何が足りないのか、何が問題なのかを見つけ、気付くことに大きな意味があると感じています。

GPゾーンに関する研究の進展に伴い、最近ではGPゾーン形成のさらに前駆段階の挙動の重要性が認識されています。きわめて微小な溶質クラスタ(ナノクラスタ)がごく初期に形成され、これらの構造や組成が続く時効硬化に大きく影響することが明らかになってきています。ナノクラスタはこれまでの研究、たとえば、電気比抵抗測定や熱分析などからその存在が示唆されていましたが、最近では三次元アトムプローブ(3DAP)装置により原子の集合状態や組成を直接観測

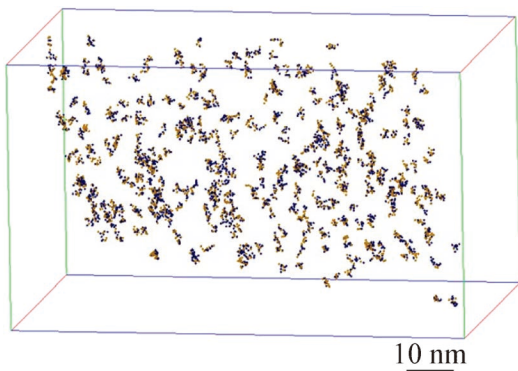


図5 Al-0.62%Mg-0.93%Si合金の自然時効(室温, 108 ks)試料の三次元アトムプローブ(3DAP)原子マップ。Mg原子およびSi原子からなる微細な溶質クラスタが形成。(オンラインカラー)

できるようになりました。図5にAl-Mg-Si合金の自然時効(室温時効)で形成された微小な溶質クラスタの例を示します<sup>(1)</sup>。硬さ変化や電気比抵抗変化としてマクロ的に捉えていたものが、現在では原子レベルで観測が可能となり、個人的に感慨深いものがあります。これらの結果と第一原理計算などの計算科学とを結びつけた解析も近年行われるようになりました。工業材料としてのアルミニウム合金を考えると、強度、延性、成形性などの特性は基本的に重要であり、自動車用軽量材料としても適用が広がっています。

自分の研究生活の中で卒研のテーマが契機となり、時効析出の研究は中心テーマとしてこれまで取り組んできました。研究の入口として時効析出はありましたが、奥は深く、進むほどに様々な興味が広がり、力学的挙動、熱力学的挙動、速度論的挙動、さらには微視的構造の関わる諸現象に関心が向き、最近ではナノスケールの溶質クラスタの3DAPによる解析や原子間相互作用の第一原理計算による解析などと結びつけ、より普遍性のある理解を求めて自問しています。今後はAIとのコラボレーションによる全く新しい展開も出てくると思います。その中にあっても「なぜ？」を考え、基礎現象の理解を深めることはますます重要になると思います。ある意味では一つのことを深化させることにより、そこから様々な広がりが出てくることを身をもって感じています。以前に文筆家の白洲正子が、一つのことをどんどん掘り下げて行けばやがては地下水脈に至り、地下水脈はいろいろな流れに繋がりが広がっていく、というようなことを話していました。同じような感慨を覚えています。

ささやかな自分の研究生活を振り返ると、いろいろなところで人や装置との出会いという縁があり、その縁がまた次の縁を生むという形で研究が進んできたとの感慨があります。研究は基本的には自分で考え、自分で推し進め、自分で整理・理解して発信することですが、その過程で多くの人との交流やディスカッションなどを通してはじめてより深化させることができると思います。また時には先達の人達と言わば仮想的な対話を行い、そこから様々なヒントを得、より深い普遍的な展開が可能だと思えます。私のささやかな体験がいくらかでもご参考になれば望外の喜びとするところです。

## 文 献

- (1) Y. Aruga, M. Kozuka, Y. Takaki and T. Sato: Metall. Mater. Trans. A, **45A** (2014), 5906-5913.  
(2022年6月6日受理)[doi:10.2320/materia.61.595]



里達雄

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
1979年 東京工業大学大学院博士課程 修了  
1979年 東京工業大学工学部金属工学科助手  
1988年 英国マンチェスター大学客員研究員  
1991年 東京工業大学工学部金属工学科助教授  
1999年 東京工業大学工学部金属工学科教授  
2012年 東京工業大学精密工学研究所教授  
2015年 東京工業大学定年退職  
現在 放送大学客員教授  
日本アルミニウム協会顧問  
(株)神戸製鋼所鉄鋼アルミ事業部門顧問  
専門分野: 金属材料組織学, 非鉄金属材料学  
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

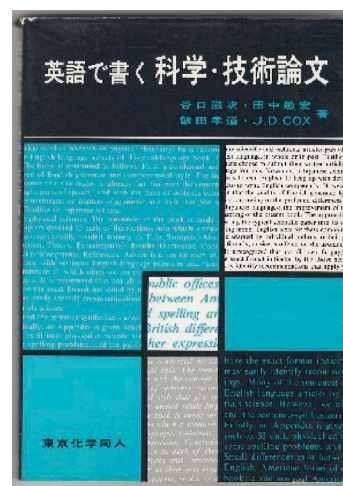


# 思い出の教科書、この一冊!

## 英語で書く科学・技術論文

谷口滋次・田中敏宏・飯田孝道・J. D. Cox(著)  
東京化学同人 1995年

京都大学大学院エネルギー科学研究科 袴田昌高



■教科書の表紙。

このコーナーではこれまでに金属をはじめとする材料科学関連の専門書がたくさん紹介されていますので、少し違う観点から、こちらの教科書を挙げます。本書の末尾に示されているように、著者らの専門は、腐食科学・表面工学(谷口)、材料熱力学(田中)、材料熱物理学(飯田)、有機物理化学(Cox)であり、金属工学・材料科学の広い分野に関連する、良質な英作文の例(と、もちろん、よくない例も)が豊富に示されています。

この教科書を私が手にしたのは、博士後期課程に進学する前後、さあ投稿論文を英語で書かなくては、と意気込んでいたころではなかったかと思います。英文で書かれた論文を読むことにある程度慣れてきたころに、いざ自分で英語論文を書いてみよう、と、まずはそれまで読んできた先行研究論文の表現をまねしようとするわけです。が、もちろん自分の研究の論文ですから、いわゆる完全に「コピペ」というわけにもいきません。自分のやろうとしていること、実験装置、結果がどのようなものであるかはわかっているわけですが、それを英語で正確に表現しようとすると、行き詰まってしまう。……英語の勉強は実際のところ大学1、2年生で一度終えてしまっていますから、どうしたものかと大学の書店に行き、この良書に出会ったのでした。当時(約20年前)はインターネットで書籍の評判を事前に調べてから書店に行くようなことはほぼあり得ませんでしたから、ふらっと書店に行って材料科学研究者の書くこの教科書に出会えたのはラッキーだったとも、また、書店の品ぞろえの良さのおかげだとも思います。

この教科書をよすがとして、あとは高校生のころに使っていた英文法の参考書ときどき見返しつつ、最初の英語論文を書き上げたものでした。私の書いたものが結果としてよいものだったかどうかはわかりませんが、以降も、英語論文執筆のよいナビゲーションとして何回も参照し、今では、小口(ページを指でめくる部分)が他の専門書と同じかそれ以上に汚れてしまっています。

さて現在、機械翻訳の技術が急速に向上し、インターネットで簡単に、かなりの量の文章を(少なくとも見かけ上)翻訳できる時代になりました。実際に、研究室の院生にゼミで

論文紹介をさせると、プロジェクタの画面に、明らかに英文を翻訳サイトで訳したであろう日本語のメモが見えることがあります。その院生は英文を読むのではなく、機械翻訳された日本語を(おそらく最初に)読んでいる、というわけです。そういう姿勢に、私などは物足りなさや不安を感じてしまいますが、論文誌の数そのものが増えている現状などもありますから、考え方を変えないといけないのかもしれません。

『英語で書く科学・技術論文』を読み直して気になったので、試しに、以下の和文を、機械翻訳にかけてみました。

「熱電対を埋め込んだ試料を用いて、温度を校正した。」

2種類の翻訳サイトは、いずれも以下の英文を翻訳結果として返してきました。

“Temperatures were calibrated using samples with embedded thermocouples.”

2つの翻訳サイトが一字一句同じ英文を返してきたことにも驚きますが、例えば、この英文をそのまま英文の論文投稿に用いられるかどうかを考えると、自分で英文を書いたことのある人なら「thermocouples と複数形になっているのは変」と気づけるでしょう(校正はふつう1つの熱電対で行うでしょうから)。ただ、もっと気づきにくい、注意すべき点があります。『英語で書く科学・技術論文』には、以下のように書かれています。

「日本語では『温度を校正』、『温度を検定』するといっても不自然に聞こえないし、実際この表現は使われている。しかし、温度は物理量(熱力学量)であるので、校正や検定はできない。(中略)The thermocouple was calibrated with ~. と書くべきである」

……というわけで、最初の日本語が厳密でなかったものを、機械翻訳はそのまま英語に直してしまいました。厳密でない日本語が全く間違っている、とも言えませんから、難しい問題です。機械翻訳ソフトにももっと学習してもらいたいところですが、論文を英文で書く(のが必ずしも得意ではない、私のような)研究者も、もうしばらくは本書のようなルールブックを頼りに、勉強しつづける必要がありそうです。

(2022年5月17日受理) [doi:10.2320/materia.61.599]

# 本 会 記 事

会 告	2022年秋期講演大会ご案内と参加申込みについて	600
	懇親会参加募集案内	601
	新型コロナウイルス感染拡大防止対策と参加者へのお願い	602
	ランチョンセミナー開催のお知らせ	602
	ランチタイム学生キャリアサポートセミナー開催のお知らせ	603
	付設展示会開催のお知らせ	603
	女性会員のつどいのご案内	604
	託児室設置のお知らせ	604
	会費自動振替制度のご案内	605
	シニア制度について	605
	永年会員制度について	605
	終身会員制度について	605
	第46回技術開発賞募集	605
	第73回金属組織写真賞作品募集	605
	欧文誌編集委員会からのお知らせ	606
	研究集会	607
	2023年度講演大会委員候補者の推薦のお願い	608
	2023年春期講演大会の外国人特別講演および招待講演募集	613
	金属学会セミナー(特別講座)開催案内	614
	日本金属学会オンライン教育講座 開催案内	615
支部行事	次号予告	607 622
掲示板	新入会員	612 620
会誌・欧文誌	9号目次 行事カレンダー	622 623

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

\*本会のメールアドレスのドメイン変更のお知らせ\*  
 2022年8月1日より、本会のメールアドレスのドメインを@jimm.jpに変更いたしました。  
 皆様にはお手数をおかけしますが、ご承知おき願います。

## 会 告 (ホームページもご参照下さい)

### 2022年秋期(第171回)講演大会のご案内と参加申込みについて

2022年秋期講演大会は、9月20日(火)から23日(金・祝)まで福岡工業大学にて開催いたします。(新型コロナウイルス感染症の状況によってはオンライン開催に変更する場合があります。)高校生・高専学生ポスターセッションは9月28日(水)にオンラインにて開催いたします。

尚、参加申込みは、すべてインターネット申込みとなります。詳細は、同封の付録プログラムの参加申込要領をご覧ください。

#### 日 程

日 時	行 事
9月20日(火) 13:00~	ポスターセッション
9月21日(水) 9:00~ 9:40 10:00~17:00 18:30~	贈呈式 学術講演 懇親会
9月22日(木) 9:00~17:00	学術講演
9月23日(金・祝) 9:00~17:00	学術講演
9月28日(水)	高校生・高専学生ポスターセッション(オンライン)



## 参加申込要領(参加申込みは全てウェブサイトからとなります)

### 大会参加申込期間および URL

(事前申込)2022年 5月25日～9月2日

<https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn/>

(後期(当日)申込)2022年 9月8日～9月28日

[https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn\\_after/](https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn_after/)

## 2022年秋期講演大会懇親会参加募集案内

2022年秋期講演大会における懇親会を日本鉄鋼協会と合同で下記の通り開催いたします。お申込みにあたり、参加資格や注意事項がございますので、ご熟読し、ご了承の上でお申込み下さい。

**開催日時** 2022年9月21日(水) 18:30-20:30

**開催場所** ザ・ルイガンズ. スパ&リゾート(〒811-0321 福岡市東区大字西戸崎18-25)

**開催形式** 屋内会場の Grand Garden において全員着席形式での飲食。

**会場への移動** 講演会場からシャトルバスを運行いたします。

**参加資格** 9月18日から当日までのPCR検査または9月20日から当日までの抗原検査(医療用, 研究用を問わず)の陰性を確認できるものを、9月21日に懇親会受付に提示できる方。 ※検査費用はご負担下さい。

**募集人数** 40名 ※上限に達し次第締め切らせて頂きます。(招待者や関係者は申し込み不要です。)

**注意事項** 飲食時以外はマスクを着用し、席の移動やお酌はご遠慮下さい。また、大声を出しての会話は控えて下さい。シャトルバス乗車時の検温、入場前の手指の消毒にご協力願います。

**留意事項** 新型コロナウイルスの感染状況によっては、懇親会の中止やお酒の提供を中止することがあります。

**申込期間** 2022年8月1日(月)～9月9日(金)

※事前予約のみとなります。また、期間内であっても募集人数に達し次第締め切らせて頂きます。

**参加費** 8,000円

**申込方法** <https://forms.gle/TxEEunJdMGvQPwcd7>(こちらからお申し込み下さい。8/1より受け付け開始)

### 当日の参加方法・参加費支払い方法

9月21日(水)午後12時からC棟1階金属学会受付に懇親会専用受付を設置します。

- ① 懇親会受付に9月18日から当日までのPCR検査陰性を確認できるもの、または9月20日から当日までの抗原検査陰性を確認できるものを提示下さい。(提示頂けない場合は、お申込みされていてもご参加頂けません)
- ② 検温を受け、参加費を現金でお支払い下さい。(37.5℃以上の方はご参加いただけません)
- ③ 領収書と懇親会参加証をお受け取り頂き、懇親会バス出発時間までにバスに乗車下さい。
- ④ シャトルバスの出発時間は当日受付でご確認下さい。

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 講演大会係

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312 E-mail: [annualm@jim.jp](mailto:annualm@jim.jp)

## 2022年秋期講演大会会場周辺のご案内

まてりあ61巻7号448頁をご覧ください。皆様のご参加をお待ちしております。

## 日本金属学会2022年秋期講演大会 新型コロナウイルス感染拡大防止対策と参加者へのお願い

新型コロナウイルスの感染拡大防止と参加者の安全のため、講演大会開催にあたり以下の対策を実施いたします。参加者の皆様にはご不便をおかけいたしますが、ご協力をお願いいたします。

なお、公的機関(保健所等)から法令や正当な理由に基づいた要請があった場合には、参加者の個人情報を提供することがあることをあらかじめご了承ください。

### 参加者への要望事項

- 新型コロナウイルスワクチンを3回接種するか、参加前の72時間以内のPCR検査または24時間以内の抗原検査で陰性を確認してご参加下さい。
- 接触確認アプリ(COCoA)をインストールし、起動しておいて下さい。

### 当日の受付での参加申込の中止について

- 受付での三密回避のため、受付での参加申込の受付は行いません。
- 事前・当日に関わらず参加申し込みおよび参加費支払いはWeb上で行って下さい。

◇詳細は、同封の付録プログラムにてご確認ください。

## ランチョンセミナー開催のお知らせ

秋期講演大会にて、ランチョンセミナーを開催いたします。本セミナーは、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企画です。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 2022年9月21日(水) 12:10~12:50

会 場 福岡工業大学 金属学会講演会場(下記各参加企業参照)

参加費 無料 昼食(ドリンク付)を無料提供いたします。

参加方法 9月21日(水) 8:30より参加券を「付設展示会場」にて配布いたします。

日本金属学会、または日本鉄鋼協会の大会参加証をご提示下さい。引き換えにご希望のセミナー参加券をお渡しいたします。時間になりましたら、参加券をご持参の上、セミナー会場までお越し下さい。

※予定数(30枚)に達し次第、配布は終了いたします。(参加券をお持ちでない場合でもご聴講頂ける場合がございます)

※ランチョンセミナーは同業者様等のご入場(セミナー参加券をお持ちの場合でも)をお断りする場合がございます。予めご了承ください。

参加企業(7/末現在)

○オックスフォード・インストゥルメンツ㈱:G会場(D棟31講義室)

「EBSD解析ソフト AZtecCrystal の材料解析への応用例」(オックスフォード・インストゥルメンツ㈱ 森田博文)

動画版は、大会ホームページよりご覧下さい。

○オックスフォード・インストゥルメンツ㈱

## ランチタイム学生キャリアサポートセミナー開催のお知らせ

秋期講演大会にて、ランチタイム学生キャリアサポートセミナーを開催いたします。本セミナーは、学生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、各社の会社概要、今後の採用情報、インターンシップ募集情報、研究開発動向等を解説する企画です。学生参加者の皆様には、是非ご視聴頂き、リクルート活動にお役立て下さい。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 2022年9月23日(祝・金) 12:10~

会場 福岡工業大学 金属学会講演会場(下記各参加企業参照)

参加費 無料 昼食(ドリンク付)を無料提供いたします。

参加方法 9月21日(水) 8:30より参加券を「付設展示会場」他で配布致します。

日本金属学会、または日本鉄鋼協会の大会参加証をご提示下さい。引き換えにご希望のセミナー参加券をお渡しいたします。(福岡工業大生の皆様はどなたでもご参加できます。学生証をご提示下さい)

時間になりましたら、参加券をご持参の上、セミナー会場までお越し下さい。

※予定数(各会場40枚)に達し次第、配布は終了いたします。(参加券をお持ちでない場合でもご聴講頂ける場合がございます)

### プログラム

9月23日(祝・金) ※時間は、多少前後する場合がございます。

参加企業

#### C会場(D棟22講義室)

12:10~ 住友電気工業㈱

「世界の社会インフラを支える住友電工の金属製品及び技術のご紹介」

12:35~ 大和工業㈱

大和工業グループ「会社概要説明~鉄で未来を 未来の鉄を~」

13:00~ 住友金属鉱山㈱

#### E会場(D棟24講義室)

12:10~ ㈱豊田中央研究所

「企業研究所の研究職の働き方 ~研究テーマ事例、働く環境・大学との違い、キャリアのご紹介~」

12:35~ 東邦チタニウム㈱

東邦チタニウム株式会社「会社概要説明会~私たちの暮らしに広がる“チタン”」

## 付設展示会開催のお知らせ

秋期講演大会にて、付設展示会を開催いたします。金属材料関連各社の製品やサービスを紹介します。また、展示会場では、ランチョンセミナーのチケット配布(無料)、無料ドリンク(ペットボトル)の提供もいたします。是非、展示会場へご来場下さい!(大会ホームページでも出展情報を掲載いたします)

開催期間 2022年9月21日(水)~23日(祝・金) 9:00~17:00(23日は14:00まで)

展示会場 E棟 3F(R1)

出展企業(8/10現在)

○アドバンスソフト㈱

○日本テクノプラス㈱

○㈱アントンパール・ジャパン

○パルステック工業㈱

○伊藤忠テクノソリューションズ㈱

○ヴァーダー・サイエンティフィック㈱

○オックスフォード・インストゥルメンツ㈱

他

○カールツァイス㈱

○㈱TSLソリューションズ

○東芝ナノアナリシス㈱



## 日本金属学会・日本鉄鋼協会 第11回女性会員のつどいのご案内

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ョンミーティング、合同ホームページや育児・男女共同参画等の情報交換を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。

秋期講演大会期間中に開催していた、「女性会員の集い」を今年は3年ぶりにオンラインで行います。女性会員同士、気軽に意見交換をして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委員会

**日時** 2022年9月23日(金)12:00~13:00

**会場** 福岡工業大学 B棟 3階 B32(金属学会 R会場)

**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・鉄鋼協会女性会員、学生さん

**参加申込** 申込みは不要です。直接、会場へお越し下さい。※お弁当やお茶のご用意はございませんのでご了承下さい。

**問合せ先** 梅津理恵(東北大学) E-mail: rie.umetsu[at]imr.tohoku.ac.jp

### 2022年秋期講演大会会期中の託児室設置のお知らせ

2022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託児室利用規約をご確認の上「利用規約及び同意書・申込書」「連絡票」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
2022年9月20日(火)	12:30~18:00
2022年9月21日(水)	8:30~17:30
2022年9月22日(木)	8:30~17:30
2022年9月23日(祝・金)	8:30~16:30

■場所 福岡工業大学キャンパス内(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~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時間の追加料金がかかります。

※兄弟割引あり 下のお子さん(弟もしくは妹)は上記金額の半額。

利用者は利用当日、シッターの方(保育スタッフ)に利用料金をお支払い下さい。

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：㈱テノ・サポート

#### ■お申込み方法

• 日本金属学会・日本鉄鋼協会ホームページ託児室案内の託児室利用規約をご確認の上、「利用規約及び同意書・申込書」「連絡票」をダウンロードし、必要事項を記入の上、下記シッター会社へメールにてお申し込み下さい。尚、ご利用にあたり「託児サービスをご利用のお客様へ」を必ずお読み下さい。

• 申込の際は、件名に「秋期講演大会の託児室予約」とご記入の上、利用申込書を添付して下さい。

※申込受領後3営業日以内に、㈱テノ・サポートより返信メールをお送りします。

#### ■申込期間

2022年8月1日(月)~9月6日(火)16:00まで

(定員に達し次第締め切らせて頂きます)

#### ■申込・問合せ先

株式会社テノ・サポート 前田

☎ 092-263-3580(代表) FAX 092-263-3581

E-mail: info@teno-support.co.jp

URL: <https://baby.teno-support.co.jp/>

\*託児室利用規約・託児室利用申込者は本会託児室案内ホームページでダウンロードして下さい。



## 会費の自動振替のご案内

2023年度会費自動振替のご案内を申し上げます。ホームページからのお手続きを宜しく願いいたします。

- ・ホームページ：入会・会員→会費支払方法
- ・2023年度会費自動振替申込締切 **2022年10月3日(月)**

問合せ・申込書送付先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32  
(公社)日本金属学会 会員サービス係 宛  
☎ 022-223-3685 ☎ FAX 022-223-6312  
E-mail: member@jimmm.jp

## シニア会員制度について

65歳以上の正員の会費を半額とする「シニア会員」制度を設けることとしました。

シニア会員には「まてりあ」の冊子は送付せず、電子ジャーナルの閲覧のみが可能ですが、冊子希望者は実費相当額の3,000円をお支払いいただければ冊子を購読することができます。

シニア会員を希望される方は申し出が必要ですので、**11月30日**までに、氏名、会員番号、生年月日を添えて下記問合せ先にお申し出下さい。

問合せ先 (公社)日本金属学会 会員サービス係  
☎ 022-223-3685 E-mail: member@jimmm.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す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會に諮り、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 会員サービス係  
〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32  
☎ 022-223-3685 E-mail: member@jimmm.jp

## 終身会員制度について

入会歴が40年に満たないために永年会員となっていただけの方に、満60歳以上満65歳以下の会員が70歳までの会費を前納いただくと「終身会員」の称号を贈り、以降の会費を免除いたします。前納会費の額は70歳までの会費の総額に比べて割安となっておりますので、ぜひご利用下さい。

年齢(2023年1月1日時点)	前納会費	(70歳までの通常会費)
60歳	80,000円	(110,000円)
61歳	70,000円	(100,000円)
62歳	65,000円	(90,000円)
63歳	55,000円	(80,000円)
64歳	50,000円	(70,000円)
65歳	40,000円	(60,000円)

ご希望される方は、**11月30日**までに、氏名、会員番号、生年月日を添えて下記連絡先にご連絡下さい。前納会費の請求書をお送りします。

問合せ先 (公社)日本金属学会 会員サービス係  
☎ 022-223-3685 E-mail: member@jimmm.jp

## 第46回技術開発賞「新技術・新製品」記事募集

応募締切：2022年11月1日(火)

**賞の名称** 第46回公益社団法人日本金属学会 技術開発賞  
**賞の対象** まてりあ「新技術・新製品」記事に掲載された記事(第62巻1号から)

**表彰** 2023年9月の秋期講演大会

**申込URL** <https://gijyutsu.jim.or.jp/entry>

**詳細** まてりあ8号528頁 or ホームページ→本会賞の募集

**問合せ先** (公社)日本金属学会各賞係  
☎ 022-223-3685 ☎ FAX 022-223-6312

E-mail: award@jimmm.jp

「新技術・新製品」記事の問合せ先

まてりあ係 E-mail: materia@jimmm.jp

## 第73回金属組織写真賞作品募集

応募締切：2022年11月1日(火)

募集部門

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して下さい。

**申込要領** 応募は、下記 URL の申込フォームにより説明文を入力し、写真作品データを提出して下さい。

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

**詳細** まてりあ 8号529頁 or ホームページ→本会賞の募集

**問合せ先** 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32  
(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: award@jim.or.jp

欧文誌編集委員会からのお知らせ

### 特集企画の投稿募集

#### ■Superfunctional Nanomaterials by Severe Plastic Deformation

This special issue covers recent progress regarding the development of advanced functional materials by severe plastic deformation (SPD). The SPD process is now considered a major technology to produce ultrafine-grained materials. Although these ultrafine-grained materials originally received attention due to their enhanced mechanical properties, recent studies introduced these materials as a new family of functional materials with high potential for various applications. In addition to grain refinement, SPD is also capable to control the atomic and electronic structure of different kinds of metallic and nonmetallic functional. This special deals with the influence of SPD on microstructure, crystal structure and properties of functional materials. Although the main focus of the special issue is on functional properties, articles on various experimental aspects, simulation, modeling, processing, commercialization and history are welcome.

上記テーマに関する特集を、Materials Transactions 64巻7号(2023年7月発行)に予定しております。多数ご投稿下さいますようお願いいたします。

**掲載予定号** 第64巻第7号(2023年)

**原稿締切日** 2023年2月1日(水)

#### ■Nanostructured Functional Materials and Their Applications IV (ナノ構造を有する機能性材料とその応用(その4))

本特集号は、2015年、2018年、2020年に、それぞれ第1号 vol. 56, No. 9(40件の論文)、第2号 vol. 59, No. 7(15件の論文)、第3号 vol. 61, No. 8(31件の論文)として計3回の特集号として刊行したものの後継となる第4号に当たるものであり、前回刊行後の当該分野の進展に関する先端的な論文を募集する。

ナノ構造を有する材料はバルク材料とは異なる、特異な機能を発現するものが多数見いだされ、それらの機能を工学的に応用して広く社会に浸透してきている。現在までのナノ構造物質に関する研究成果を集約する共に、今後の更なるナノ構造を有する材料開発の発展に向けて、以下のトピックスを中心に成果を集める。

- ナノ構造を有する磁性体、誘電体、圧電体
- ナノ構造を有する半導体、複合材料、フォトンクス材料
- ナノ構造物質の作製と評価技術
- ナノ構造を有する物質の応用
- 計算材料科学
- マテリアルズインフォマティクス及びデータ駆動型材料科学

上記テーマに関する特集を、Materials Transactions 64巻8号(2023年8月発行)に予定しております。多数ご投稿下さいますようお願いいたします。

**掲載予定号** 第64巻第8号(2023年)

**原稿締切日** 2023年1月6日(金)

- 投稿に際しては、日本金属学会欧文誌投稿の手引・執筆要領(本会 Web ページ)に従うこと。
- 通常の投稿論文と同様の審査過程を経て、編集委員会で採否を決定する。
- 著者は、投稿・掲載費用をご負担願います。

**問合せ先** 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会欧文誌編集委員会

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: sadoku@jim.or.jp

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

～ ご投稿をお待ちしております。～

## “微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング” 2022

[共催] 第4分科

2019年度に発足しました「微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング」の第4回研究集會を徳島市内にて開催いたします。今回の招待講演テーマは、「微小材料試験法の最前線」です。圧入・単軸変形、それらの関係や応用例を議論します。招待講演のほかに、学生・若手研究者を対象としたポスター発表会(現地開催)を行い、ポスター賞を授与いたします(副賞あり)。

皆様どうぞ奮ってご参加下さい。

日時 2022年11月24日(木)13時00分～17時00分

11月25日(金)9時00分～12時00分

場所 ザ・グランドパレスホテル 徳島市寺島本町西 1-60-1 (JR 徳島駅 至近)

4F メイプルルーム <https://www.gphotel.jp/>

企画責任者 大村孝仁(物質・材料研究機構)

参加費 一般5,000円 学生1,000円(現地にて現金でお支払い下さい)

\*対面を基本としますが、オンライン参加(参加費は同額)も受け付けます。

交流会費 別途ご案内

(11/24予定 \*コロナの状況により判断)

申込・問合せ先

下記のA.またはB.を選択いただき、下記項目をメールにてお申込み下さい。

A. ポスター発表希望者：ポスター題目、発表者氏名、所属・身分〔若手(35歳未満)or 学生(高専/学部/修士/博士)], メールアドレス

締切：11月11日(金)\*先着20編

B. 聴講のみ希望者：氏名、所属、メールアドレス、現地 or オンラインの別

締切：当日まで申し込み受付可

申し込み先 [micromech\\_jim@nims.go.jp](mailto:micromech_jim@nims.go.jp)

“微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング” 2022

事務局：物質・材料研究機構 井口

<http://nims.nims.go.jp/group/sdg/micromech-jim/>

宿泊 各自で手配願います。研究会会場ホテルを割引価格でご利用いただけます。ご予約の際、研究会名をホテルにお伝え下さい。

## 支部行事

第21回 日本金属学会東北支部  
研究発表大会 開催案内

[共催] 日本大学工学部, 日本鉄鋼協会東北支部

日本金属学会東北支部では、下記の要領で研究発表大会を開催することといたしました。

2020年度はオンライン、2021年度はハイブリッドでの開催としておりましたが、今年度は対面にて開催いたします。皆様の積極的なご参加をお待ちしております。

※発表申込は締め切りました。現在、聴講参加の申込を受付中です。

日時 2022年10月4日(火) 10:30-17:00(予定)

会場 日本大学工学部 54号館中講堂

(〒963-8642 郡山市田村町徳定中河原1)

プログラム 基調講演3件、口頭発表6件程度、ポスターセッションを行う予定です。

確定次第、参加申込を頂いた皆様にご連絡致します。

参加料 無料

聴講申込 下記 Google フォームより申し込み頂きますようお願いいたします。

QR コードからも読み取り可能です。



申込締切 9月30日(金) 正午まで

<https://forms.gle/ZMKTgiw7M1SN2s347>

問合せ先 日本金属学会東北支部 事務局  
(東北大学大学院工学研究科 吉見研究室内)  
☎ 022-795-7324 E-mail: [tohoku@jimm.jp](mailto:tohoku@jimm.jp)



## 2023年度講演大会委員候補者の推薦のお願い

講演大会委員および調査研究委員は、2023年4月の定時社員総会日が交替時期となっており、学会活動の一層の活性化を図るため、各界から積極的にご協力いただける気鋭の人材を求めています。

以下の要領で、次期講演大会委員候補者の推薦を募集いたします。

1. 講演大会委員選出：約170名程度を選出します。
2. 構成員の任期：2023年定時社員総会当日から2年後の定時社員総会終了時まで。
3. 組織の体制(講演大会委員会、調査研究委員会)

講演大会委員会	調査研究委員会	大 分 類
1 分野	1 分科	材料と社会および先進機能材料
2 分野	2 分科	物性および電気・磁気関連材料
3 分野	3 分科	組織および計算科学
4 分野	4 分科	力学特性
5 分野	5 分科	材料化学
6 分野	6 分科	材料プロセッシング
7 分野	7 分科	生体・医療・福祉
8 分野	8 分科	構造材料
9 分野	9 分科	エネルギー関連材料

#### 4. 講演大会委員会の構成員

- (1) 委員長 1名
- (2) 副委員長 1名
- (3) 各分野の委員長 1名
- (4) 各分野の副委員長 1名
- (5) 各分野の幹事 数名
- (6) 各分野の委員 数名
- (7) その他理事会の決議による構成員 数名

#### 5. 調査研究委員会組織の構成員

- (1) 委員長 1名
- (2) 副委員長 1名
- (3) 各分科の委員長 1名
- (4) 各分科の副委員長 1名
- (5) 各分科の幹事 数名
- (6) その他理事会の決議による構成員 数名

#### 6. 委員候補者の資格：金属学会正員であり、2023年4月末時点で45歳以下の方

#### 7. 推薦資格：現講演大会委員および現調査研究委員または2名以上の正員の連名による推薦(自薦も可)自薦の場合も、上記の推薦者は必要です。

#### 8. 推薦用紙記入方法

所定の推薦用紙で以下を明記の上、金属学会事務局宛(下記メール宛)に推薦下さい。

推薦された方は、講演大会企画委員会において次期委員候補者を協議いたします。

推薦用紙はホームページよりダウンロード出来ます。

①候補者氏名 ②生年月日 ③推薦分野(分科) ④勤務先・職名 ⑤連絡先住所・電話・E-mail

#### 9. 候補者推薦締切：2022年10月3日(月)

問合・送付先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

公益社団法人日本金属学会講演大会委員会担当係 ☎ 022-223-3685 E-mail: stevent@jimm.jp



講演大会セッション（委員専門分野）

新分野	大分類	中分類	No	セッションキーワード	キーワード	
1分野	1.材料と社会	材料と社会	1.1	教育	専門教育、共通教育、企業での教育、生涯教育、小・中・高校生への教育、カリキュラム、授業の実際、教材・教育の評価、社会人教育	
			1.2	歴史・材料考古学	金属学・材料科学の歴史、金属技術の歴史・変換、材料考古学、文化財保存	
			1.3	技術革新・技術伝承	IoT、マテリアルインターフェース、マテリアルソフトウェアエンジニアリング、材料情報、知的所有権、その他の金属学・材料学に関連した新分野・境界分野	
			1.4	環境	LCA、リスクマネージメント、資源経済、環境・資源政策、材料の環境信頼性評価、製造物責任、環境低負荷材料、易リサイクル材料・設計、易解体設計、マテリアルセレクション、省材料設計、高寿命材料・設計、材料のリサイクルシステム、材料資源環境システム、再資源化用途開発、土壌浄化、環境修復	
			1.5	ダイバーシティ	男女共同参画、LGBTI、国際化、学際協力、世代間・業種間融合	
			1.6	新領域・その他		
	12.先進機能材料	先進機能材料	12.1	萌芽材料		
		12.2	新領域・その他			
2分野	2.物性	物性	2.1	磁気機能・磁気物性	磁気的性質、磁気光学的性質、電子状態、熱磁気効果（スピンゼーベック効果、異常ネルスト効果、磁気熱量効果、磁気ハイパーサーミア等）、核物性等	
			2.2	半導体機能・電気物性	誘電的性質、光学的性質、電子輸送、薄膜・表面・界面物性、熱的性質（ゼーベック効果、ヘルチエ効果等）、原子輸送、金属絶縁体転移等	
			2.3	構造物性	結晶成長、結晶構造、準結晶構造、非晶質固体構造、格子ダイナミクスと安定性、相転移（変態）、不整合・整合構造、格子欠陥、粒界等	
			2.4	物性評価	照射効果、ナノスケール量子効果、トンネル効果、メスパウアー効果、核磁気共鳴、分光・発光・回折一般等	
			2.5	新領域・その他		
	9.電気・磁気関連材料	電気・電子・光関連材料		9.1	伝導・実装材料	電気伝導材料、電極材料、電子実装材料、配線材料、マイクロ接合材料、フラーレン、カーボンナノチューブ、熱伝導材料等
				9.2	半導体・誘電体材料	半導体材料、誘電体材料、圧電体材料、センサー材料、太陽電池、High-k材料、低次元物質、ナノ粒子・（超）微粒子、原子クラスター等
				9.3	光・電磁波関連材料	光学結晶材料、光記録材料、液晶材料、光ファイバー材料、光学ガラス材料、テラヘルツ等
				9.4	強相関電子系材料	超伝導材料、トポロジカル絶縁体、強相関電子系材料、マルチフェロイック材料等
		磁性材料		9.5	ソフト・ハード磁性材料	ソフト磁性材料（高透磁率材料（合金系、フェライト系、アモルファス、ナノ結晶等）、永久磁石材料（希土類系、合金系、フェライト系等）、電波吸収体・ノイズ抑制体材料等
				9.6	スピントロニクス・ナノ磁性材料	磁気抵抗効果（AMR、GMR、TMR等）材料、スピンメモリー・センサー材料、スピンカロリトロニクス材料、スピン注入技術、スピン流制御技術、スピン（軌道）トルク制御技術、磁気記録・磁気デバイス用材料、磁性（超）薄膜・多層膜・磁性金属人工格子、磁気スキルミオン等
				9.7	磁気機能材料	磁歪材料、磁気冷凍材料、フラストレーション材料、反強磁性材料、相転移誘起材料（磁場誘起相変態等）等
				9.8	新領域・その他	
				9.9	新領域・その他	
3分野	3.組織	相安定性・相変態	3.1	熱力学・状態図・相平衡	熱力学、状態図、相平衡、準安定、非平衡、相転移、金属間化合物、規則-不規則転移、磁気転移等	
			3.2	拡散・相変態	拡散、偏析、析出、拡散変態、規則-不規則変態、不連続析出、粒界・相界面上析出等	
			3.3	マルテンサイト変態・変位型相変態	マルテンサイト変態、変位型相変態（ベイナイト変態含む）、形状記憶・超弾性材料、磁性形状記憶合金、TWIP、TRIP、エージング・テンパリング、双晶変形、熱・応力・磁場・電場誘起相変態、組織制御、組織形成と機械的性質、プロセス（粉末冶金・複合材料含む）、SMAアクチュエータ・応用、マルテンサイト変態に関わる材料機能（タンピング、磁気・弾性熱量効果等）	
			3.4	合金・アモルファス・準結晶	アモルファス、金属ガラス、準結晶、高エントロピー材料等	
			組織制御	3.5	組織制御技術	時効・析出、熱処理、加工、加工熱処理、合金元素添加、急冷凝固、メカニカルアロイング、界面接合強さ、複合化、多層化、薄膜、積層造形、ミルフィーユ構造、コーティング、シミュレーション等
				3.6	再結晶・粒成長・集合組織	回復・再結晶、集合組織、粒成長、粒界、異相界面、双晶等
				分析・解析・評価	3.7	組織観察・分析
			3.8		計算材料科学・材料設計	理論、シミュレーション等
			3.9	新領域・その他		
	11.計算科学	データ科学	構造・組織・特性・物性	11.1	計算材料科学・材料設計	計算材料科学・材料設計、第1原理電子論計算、分子シミュレーション、分子動力学法、モンテカルロ法、CALPHAD法、フェーズフィールド法、有限要素法、境界要素法、セルラーオートマトン、マルチスケール解析、マルチフィジックス解析等
11.2				データ科学	マテリアルズインフォマティクス、マテリアルズインテグレーション、機械学習、深層学習、強化学習、転移学習、逆問題、データ同化、ニューラルネットワーク、最適化、データベース、ビッグデータ、人工知能等	
11.3				新領域・その他		

新分野	大分類	中分類	No	セッションキーワード	キーワード
4分野	4.力学特性	力学特性の基礎	4.1	強度・力学特性	力学（格子欠陥、弾性、塑性、破壊力学、有限要素法、分子動力学、マイクロメカニクス等）、転位の基本的特性（運動、増殖、相互作用等）、転位と各種格子欠陥の相互作用、変形（弾性、擬弾性、塑性、粘性、粒界、変形双晶等）、各種強化機構、破壊機構（き裂やポイド発生・成長・合体等）
			4.2	塑性・疲労・破壊	延性、韌性、静的および動的破壊、破壊靱性値、疲労、応力腐食割れ、水素脆性、遅れ破壊、寿命
			4.3	高温変形・クリープ・超塑性	高温変形、クリープ、クリープ疲労、超塑性
			4.4	力学特性評価	力学特性の評価法、力学的挙動の予測（応力-ひずみ曲線、クリープ曲線等の予測、寿命予測等）、合金設計、複合材料（材料システム）設計、データベース
		力学特性と組織	4.5	欠陥と組織	転位組織、転位セル、変形帯、強加工、双晶、ポイド、亀裂
			4.6	多結晶組織	粒成長、再結晶、双晶、偏析、粒界析出、粒界反応型析出
			4.7	金属間化合物	金属間化合物、規則相、高温変形
			4.8	超微細粒組織	微細粒、バルクナノメタル、強化機構
			4.9	新領域・その他	プラストン、キンク変形、ディスクリネーション、ミルフィユ構造
5分野	5.材料化学	耐食性・耐酸化性	5.1	腐食・防食	水溶液腐食、電気化学測定、表面皮膜、腐食環境解析、孔食、すき間腐食、応力腐食割れ、大気腐食、高温高圧水腐食、水素脆化、異種金属接触腐食、エロージョン・コロージョン、腐食事例、耐食合金、耐食コーティング、腐食抑制・防錆剤、電気防食、等
			5.2	高温酸化・高温腐食	高温ガス腐食、溶融塩腐食、水蒸気酸化、エロージョン・コロージョン、超臨界環境等、耐熱材料、耐熱コーティング、超合金、金属間化合物、セラミクス材料、酸化物の特性
		表面・界面・触媒	5.3	湿式表面処理・湿式めっき	電解・無電解めっき、アノード酸化、エッチング、化成処理、イオン液体、電気化学的な成膜、ぬれ性、摩擦・摩耗・潤滑等
			5.4	気相プロセス・薄膜・厚膜作製技術	PVD、CVD、スパッタリング、プラズマプロセス、イオン注入・イオン打込み、イオンミキシング、コーティング、クラスター制御、表面処理、表面改質等、エッチング、アッシング、リソグラフィ、マイクロ・トライボロジー、マイクロ・マシニング、マイクロ・ボンディング、ケミカルメカニカルポリッシング（CMP）、溶射、肉盛り、拡散浸漬処理、ぬれ性、摩擦・摩耗・潤滑等
			5.5	表界面反応・分析	表面物性・反応、表面の構造と結晶学、吸着・脱離、表面の熱・統計力学、表面の電子状態およびエネルギー・計算科学、電気化学反応、表面・界面の作製技術、表面分析法（各種化学分析・機器分析、極微量分析、極小領域分析、状態分析、プローブ顕微鏡、顕微分光、環境やプロセスのその場分析、成分画像解析等、各種分析装置の開発、化学センサー、モニタリング法等）、コロイド材料
			5.6	触媒材料・触媒反応	触媒材料（貴金属・卑金属触媒、金属間化合物触媒、ナノ構造触媒、規則性多孔体、有機金属、光触媒等）、触媒反応（酸化、水素製造、C-H活性化、クロスカップリング、界面分子変換、排気ガス浄化等）、触媒技術と反応プロセス開発、触媒理論
			5.7	新領域・その他	
6分野	6.材料プロセス	環境・リサイクルプロセス	6.1	環境・リサイクル技術	LCA、リスクマネジメント、資源経済、環境・資源政策、材料の環境信頼性評価、製造物責任、事故解析、材料安全など、環境低負荷材料、易リサイクル材料、易リサイクル設計、易解体設計、マテリアルセレクトシオン、省材料設計、高寿命材料、高寿命設計など、分離プロセス、再資源化プロセス、材料のリサイクルシステム、材料資源循環システム、リサイクル化学、クローズドプロセス、再資源化用途開発など、
			6.2	製・精錬の物理化学	資源・原料、各種および新製・精錬法、冶金熱力学、化学反応工学、移動速度論、高温プロセス解析、数値流体力学、高純度化、分離・回収・精製、環境・リサイクル等
		溶融・凝固プロセス 高温プロセス	6.3	融体・高温物性	熱力学的諸量、融体物性、モデリング等
			6.4	凝固・結晶成長・ casting 技術	結晶成長、過冷却、非晶質、準結晶、輸送現象、高純化、鑄造、鋳物、ダイキャスト、単結晶製造技術、半溶融加工、溶射、反応性溶射、溶射素過程、等
			6.5	塑性変形・塑性加工技術	塑性加工、高ひずみ速度加工、強加工プロセス、極限環境プロセス等
		固相プロセス 固相・溶接プロセス	6.6	粉末・焼結・造形技術	粉末製造、超微粉、粉体成形・粉末冶金（焼結プロセスを含む）、メカニカルアロイング、焼結合成プロセス、粉末射出成形（金属射出成形、セラミック射出成形）、3次元造形（3Dプリンター）、コールドスプレー、スプレーフォーミング、エアロゾルデポジション、アトマイズ等
			6.7	接合・溶接・実装・接着・複合技術	メカニカルプロセス、常温接合、拡散接合、超音波接合、摩擦圧接、摩擦攪拌接合、爆発圧接、電磁圧接、溶接、ろう付け、接着、精密接着、メッキ・プロセス、はんだ付け、実装、マイクロ接合、力学特性、信頼性等
		材料評価、プロセス評価技術	6.8	材料評価技術	非破壊検査、非破壊定量評価、残留応力解析、センシング技術、信頼度評価等、各種プロセス・シミュレーション、テラヘルツ
		6.9	新領域・その他		

新分野	大分類	中分類	No	セッションキーワード	キーワード
7分野	7. 生体・医療・福祉	生体材料基礎・生体応答	7.1	細胞機能・組織再生	細胞機能、細胞間相互作用、シグナル伝達、細胞・生体組織評価、細胞増殖・分化、組織修復 (Tissue Engineering)、DDS (Drug Delivery System)、ゲノム解析・編集、細胞適合性、細胞配向、代謝回転、恒常性、石灰化、各種臓器・骨・歯牙、血管、骨芽細胞、破骨細胞、OCY (オステオサイト)、骨系細胞、細胞外基質、がん、細胞小器官、RNA、DNA、遺伝子組み換え、細胞培養、骨形態計測法、染色法、足場材料、機能性タンパク質等
			7.2	構造生体機能化	機能発現、バイオメカニクス、計算科学、金属組織・組織制御、弾性・塑性変形機構、力学機能発現 (弾性率、強度、延性、疲労、破壊)、スキャフォールド、インプラント、双晶変形、生体組織、組織配向性、人工関節、人工歯根、熱処理、多孔化、機能・組織評価法、Co-Cr合金、ステンレス鋼、生体用セラミックス、リン酸カルシウム系材料、PEEK、整形外科用材料等
			7.3	表界面生体機能化	生体/材料界面、表面修飾、ナノ表面・界面、感染防御・制御、表界面機能、骨伝導・骨誘導、バイオセンサー、抗菌性、タンパク質吸着、コーティング、化学処理、表面分析・評価、PVD、CVD、コーティング材料等
		生体材料設計開発・臨床	7.4	生体・医療・福祉材料	バイオマテリアルサイエンス、生体情報・計測、リハビリテーション医学、ユニバーサルデザイン、バリアフリー、生体機能代替、福祉用具・支援機器、ウェアラブル、IoT、AI、非磁性・低磁性、低弾性・高弾性、生体活性ガラス、生分解性材料、耐摩耗性材料、歯科用合金、生体用ハイエントロピー合金等
			7.5	生体用Ti・Ti合金	Ti・Ti合金、低弾性率、形状記憶、超弾性、オッセオインテグレーション、集合組織、人工骨・関節、相変態・組織制御、機能評価法、電子顕微鏡、β型Ti合金、ユビキタス元素、計算機シミュレーション等
			7.6	Additive Manufacturing・テラレーメイド医療材料	付加製造、3Dプリンタ、金属積層造形、金属粉末、異方性/等方性、形状/組織制御、力学特性、残留応力、生体モデリング、形状計測、格子構造、薬物送達システム、マイクロマシン、マスカスタマイゼーション、テラレーメイド医療、遠隔地診療、レーザービーム、電子ビーム、順シミュレーション・逆問題解析、溶融池シミュレーション、リアルタイムモニタリング等
			7.7	生体安全性・有効性評価	医用画像・バイオイメージング、生体シミュレーション、レギュラトリーサイエンス、生体情報・計測、医療技術倫理、細胞毒性、疾病、代謝異常、骨吸収、金属アレルギー、耐食性、疲労、疾病治療、医療機器、臨床研究、臨床応用、GLP等
			7.8	新領域・その他	
8分野	8. 構造材料	金属材料	8.1	Fe・Fe合金	Fe・Fe合金の原理・原則、鉄鋼材料、ステンレス合金、相変態 (パーライト、ベイナイト、マルテンサイト、マッシュ等)、組織制御、力学特性、計算材料科学
			8.2	Cu・Cu合金	Cu・Cu合金の原理・原則、配線材料、熱伝導材料、相変態、組織制御、力学特性、計算材料科学
			8.3	Ti・Ti合金	Ti・Ti合金の原理・原則、相変態、組織制御、強化機構、成型性、ゴムメタル、耐食性、表面処理、計算材料科学
		軽金属材料	8.4	Mg・Mg合金	Mg・Mg合金の原理・原則、相変態、長周期積層構造、組織制御、強化機構、キンク変形、ミルフィーユ構造、成型性、集合組織、耐食性、計算材料科学
			8.5	Al・Al合金	Al・Al合金の原理・原則、相変態、GPゾーン、クラスター、組織制御、強化機構、成型性、集合組織、耐食性、計算材料科学
		セラミックス材料	8.6	セラミックス材料	セラミックス材料の原理・原則、相変態、構造相転移、焼結、組織制御、機能材料、強化機構、破壊、成型性、耐熱性、計算材料科学
		耐熱材料	8.7	ジェットエンジン・ガスタービン耐熱材料	耐熱鋼、超合金、耐熱合金、高融点金属、金属間化合物、セラミックス、超高温材料、金属基複合材料、金属間化合物基複合材料、セラミックス基複合材料、プラスチック基複合材料、炭素繊維強化型複合材料、SiC繊維強化型複合材料、ジェットエンジン、ガスタービン、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース
			8.8	蒸気発電耐熱材料	耐熱鋼、超合金、耐熱合金、蒸気タービン、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース
			8.9	耐熱特性	耐熱合金、耐熱セラミックス、超高温材料、耐熱複合材料、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、熱機関、燃焼、熱伝導、熱膨張、熱衝撃、熱遮蔽、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース
		機能性構造材料	8.10	機能性構造材料	アモルファス材料、金属ガラス材料、準結晶材料、制振材料、インテリジェント・スマートマテリアル、積層造形、計算材料科学
		複合材料	8.11	複合材料	複合材料、スポーツ用品材料、積層造形、接合、組織制御、トポロジー最適化、力学特性、熱特性、電磁気特性、計算材料科学
			8.12	ポーラス材料	ポーラス材料、積層造形、接合、組織制御、トポロジー最適化、力学特性、熱特性、電磁気特性、計算材料科学
		8.13	新領域・その他		
9分野	10. エネルギー関連材料	原子力材料	10.1	原子力材料	原子炉材料、核融合炉材料、ビーム関連材料、照射損傷、照射効果
		熱電材料	10.2	熱電材料	熱電変換、熱電素子、ゼーベック効果、ペルチェ効果、熱伝導、電気伝導、など
		水素・電池関連材料	10.3	電池材料・イオン伝導材料	電極材料、電解質材料、イオン伝導材料、電池設計、電池関連物性、など
			10.4	水素化合物・水素貯蔵・水素透過・水素関連物性	金属水素化合物、錯体水素化合物、水素貯蔵、水素透過、水素脆化、水素利用、水素関連物性、機能・プロセッシング、金属-水素相互作用、同位体効果、など
		新領域・その他	10.5	新領域・その他	センサー材料、熱伝導材料、など

## 2023年春期講演大会の外国人特別講演および招待講演募集

春秋講演大会における外国人研究者による特別講演と招待講演については会員からの推薦をもとに、国際学術交流委員会において審議採択し、講演実施細目については講演大会委員会で決定いたします。2023年春期講演大会の特別講演と招待講演を募集いたしますので、下記要領によりご推薦下さい。尚、新型コロナウイルスの感染拡大状況により春期講演大会がオンライン開催に変更になる可能性もありますこと予めご了承下さい。

### 1. 特別講演

- ・講演者：著名な外国人研究者とする。
- ・講演時間：30分(討論10分)
- ・採択件数：3~4件
- ・滞在費補助：10,000円×5日(上限日数)(現地開催の場合)
- ・その他：大会参加費免除、懇親会招待

### 2. 招待講演

- ・講演者：有益な講演が期待される国内に滞在する外国人研究者とする。
- ・講演時間：15分(討論5分)
- ・採択件数：5件程度
- ・滞在費補助：なし
- ・その他：大会参加費免除

### 3. 推薦用紙

所定様式(ホームページからダウンロード下さい)により、下記メールアドレス宛に「外国人特別講演推薦」と明記しお送り下さい。送信後2~3日過ぎても受理メールの無い場合はお問合せ下さい。

### 4. 推薦書提出期日 2022年11月18日(金)

### 5. 照会・推薦書提出先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32  
(公社)日本金属学会 国際学術交流委員会宛  
☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312  
E-mail: stevent@jimm.jp

## 掲 示 板

### 〈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。  
原稿提出先：電子メール(受け取りメールの確認して下さい)  
E-mail: materia@jimm.jp

## 公 募

### ◇東北大学金属材料研究所磁性材料学研究部門 教授 公募◇

公募人員 教授1名

所 属 磁性材料学研究部門

研究分野 磁性材料学分野。新しい磁性材料の創製と新機能の開発を両輪とする磁性材料研究およびその発展の基盤となる新たな学理の開拓に意欲的に取り組んで頂ける方。

応募資格 博士の学位を有する方

着任時期 決定後、できるだけ早い時期

勤務形態 常勤 任期なし(定年65歳)

待 遇 東北大学の規定による

公募締切 2022年12月15日(木)必着

提出書類

- (1)履歴書(写真添付)
- (2)研究業績リスト(原著論文、その他の論文(プロシーディング等)、総説・解説、著書、特許、国際会議の招待講演、競争的資金獲得状況等、およびPublons ID, ScopusID, ORCID ID等のご自身の業績が登録された論文データベースのID)
- (3)主要論文のPDFファイル(10編以内)
- (4)これまでの研究概要(2000字程度)
- (5)着任後の研究計画(2000字程度)
- (6)照会可能者2名の氏名と連絡先

書類送付先 〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1  
東北大学金属材料研究所 所長 宛

URL [http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/open\\_position/detail?id=583.html](http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/open_position/detail?id=583.html)

※応募書類の封筒表面には「教授応募書類(磁性材料学研究部門)在中」と朱書きし、全てPDFファイルとしてUSBメモリーに入れて書留にてお送り下さい。

※応募書類の返却は致しませんのでご了承下さい。

※履歴書は本応募の用途に限り使用し、個人情報とは正当な理由なく第三者へ開示することは一切ありません。

問合せ先 東北大学金属材料研究所 野尻浩之

☎ 022-215-2015

E-mail: nojiri@imr.tohoku.ac.jp



## ◇東京工業大学 物質理工学院 教員公募◇

**公募人員** 准教授 1名(任期なし)  
**所 属** 物質理工学院 材料系  
**専門分野** 材料工学分野, 特に, 計算材料科学を活用した構造材料の力学解析および設計  
**職務内容** 上記専門分野の研究遂行, 大学院および学士課程学生への授業と研究指導, および組織の運営に関する業務  
**応募資格** 博士の学位もしくはそれに相当する能力を有すること  
**勤務予定地** 大岡山キャンパス(最寄り駅:大岡山)  
**着任時期** 令和5年4月1日以降, できるだけ早い時期  
**応募締切** 令和4年9月22日(木)必着  
**提出書類** 1.略歴調書, 2.業績調書, 3.主要原著論文別刷り, 4.競争的研究資金及び外部研究資金の獲得実績, 5.研究に関する実績ならびに着任後の研究構想, 6.教育に関する実績および着任後の抱負, 7.社会活動に関する実績, 8.参考意見を伺える関連分野の研究者の氏名, 所属及び連絡先, 9.応募者情報のExcelファイル.  
 詳細は以下のURLより確認し, それに従って下さい.  
<http://www.hyoka.koho.titech.ac.jp/eprd/recently/koubo/koubo.php#7499>  
**提出方法** JREC-IN Portal Web 応募システム  
[https://jrecin.jst.go.jp/seek/SeekJorDetail?id=D122071325&ln\\_jor=0](https://jrecin.jst.go.jp/seek/SeekJorDetail?id=D122071325&ln_jor=0)  
**問合せ先** 物質理工学院 材料系 教授 藤居 俊之  
 E-mail: fujii.t.af@m.titech.ac.jp

\*東京工業大学では, 多彩な人材を確保し, 大学力・組織力を高めるため, 全ての研究分野において外国人や女性の参画する均等な機会を確保します。

## ◇豊橋技術科学大学 機械工学系 教員公募◇

**公募人員** 准教授 1名  
**所 属** 機械工学系 材料・生産加工分野  
**専門分野** 各種金属基構造材料のX線, 電子線, 中性子線等の放射光を用いたナノレベルの構造解析を実施し, 加工熱処理による特性改善と先端構造材料の開発に関する分野  
**応募締切** 2022年9月30日(金)必着  
**問合せ先** 〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1  
 豊橋技術科学大学 機械工学系  
 教授 三浦博己  
 ☎ 0532-44-6697

\*公募詳細は下記URLをご覧ください。

<https://www.tut.ac.jp/about/kyoin-koubo.html>

## ◇龍谷大学先端理工学部(助教)公募◇

**公募人員** 助教(任期付)1名  
**所 属** 応用化学課程  
**専門分野** 無機・セラミックス系分野  
**担当科目** 化学合成実験, アドバンスト物質科学合成実験, 化学の英語などの予定  
**応募資格**: ①博士の学位を有するか, 着任までに学位取得の見込みがあること.  
 ②大学教育・学生指導に熱意があること.  
 ③専門分野に研究実績があり, 新しい研究分野の開拓に意欲があること.  
 ④課程・学部の諸業務に意欲的に取り組んでいただけること  
 ⑤本学の建学の精神を尊重するとともに, 教育活動を始めとする業務に意欲的に取り組む意志を有すること  
**着任時期** 2023年4月1日(予定)  
**勤務形態** 常勤, 任期5年(再任はありません)  
**応募書類** (1)履歴書(様式1, 写真貼付)  
 (2)教育業績・職務実績書(様式2), 研究業績書(様式3, 著書や論文などカテゴリに分けて記載して下さい)  
 (3)主要論文別刷り(3編以内, コピー可)  
 (4)現在までの研究概要(様式5, 図表を入れて2,000字程度)  
 (5)教育と研究に関する抱負(様式6, 1,000字程度)  
 (6)本人に関する所見を求めうる人(二人)の氏名・所属および連絡先

※書式(様式)については<https://www.ryukoku.ac.jp/employment/index.html>よりダウンロードして下さい。

## 書類送付先

〒520-2194 滋賀県大津市瀬田大江町横谷1-5  
 龍谷大学先端理工学部応用化学課程  
 課程主任 中沖隆彦

\*封筒の表には「助教応募書類」と朱書きし, 簡易書留にて郵送して下さい。

**応募期限** 2022年9月30日必着

**問合せ先** 応用化学課程 課程主任  
 教授 中沖隆彦  
 (E-mail: nakaoki@rins.ryukoku.ac.jp)  
 待遇などの詳細は直接メールにてお問合せ下さい。



## 拡散解析：基礎から最先端へ

日本金属学会「セミナー・シンポジウム委員会」企画

[協賛予定] 合金状態図研究会, エネルギー資源学会, 金属系材料研究開発センター, 素材材センター, 資源・素材学会, 自動車技術会, 軽金属学会, 日本鋳造工学会, 日本塑性加工学会, 日本鉄鋼協会, 日本チタン協会, 日本材料学会, 日本材料科学会, ステンレス協会, 日本アルミニウム協会, 軽金属製品協会, 日本ガスタービン学会, 日本機械学会, 日本MRS, 日本物理学会

合金中の拡散は、ナノ・マイクロ組織の形成過程や合金間の反応を理解するための基盤となります。Fickの法則で記述される拡散の基本関係式は、多くの教科書で説明されていますが、異相間の拡散問題や多元系実用合金に対する取り扱いなどの記述、あまり見かけません。近年では、CALPHAD法に代表される平衡熱力学計算法により多元・多相の相平衡を精度よく評価することが可能になりました。また、この計算法と多元系拡散方程式を組み合わせることにより、多元系・多相系における拡散現象をも容易に取り扱えるようになってきています。そこで今回は、合金中の拡散の基礎から応用までを学ぶことができるセミナーを企画させていただきました。当該分野における材料工学の基礎から応用までを効率的に学ぶよい機会ですので、多くの皆様のご参加をお待ちしております。

日時 2022年10月6日(木)10:00~17:30, 10月7日(金)10:30~17:00

場所 オンライン

募集定員 100名

受講料(★受講料に、以下のテキスト代は含まれませんので、ご注意ください)

受講資格	事前申込	テキスト(受講者は各自でご購入下さい)	
正員	15,000円	テキスト	金額
学生	8,000円	小山敏幸: 材料設計計算工学(増補新版) — 計算組織学編一, 内田老鶴圃(1999)	3,520円
非会員	23,000円		

(本会維持員会社社員, 協賛学協会会員は会員扱い. 学生は会員, 非会員の区別なし)

申込締切(事前予約のみ) 2022年9月26日(月)

参加申込方法 WEB申込 <https://www.jim.or.jp/seminersymposium/>

受講料支払方法 ①カード決済 ②コンビニ決済 ③銀行振込

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 セミナー・シンポジウム参加係

E-mail: [meeting@jim.or.jp](mailto:meeting@jim.or.jp) ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

プログラム(予定)

### ◆【第1日目：10月6日 10:00~17:30】

10:00~11:00 「拡散律速型の界面移動」講師 梶原正憲

11:00~12:00 「反応拡散の基礎と応用」講師 梶原正憲

12:00~13:00 一昼食・休憩—

13:00~14:00 「エネルギー散逸関数と広義のフィックの法則」講師 小山敏幸

14:00~14:15 一休憩—

14:15~15:45 「CALPHAD法からフェーズフィールド法へ(拡散現象を対象に)」講師 小山敏幸

15:45~16:00 一休憩—

16:00~17:00 「スピノーダル分解理論」講師 小山敏幸

17:00~17:30 質疑応答

### ◆【第2日目：10月7日 10:30~17:00】

10:30~12:00 「CALPHAD法をベースとした拡散理論体系」講師 小山敏幸

12:00~13:00 一昼食・休憩—

13:00~14:30 「多成分系における拡散対解析」講師 小山敏幸

14:30~14:45 一休憩—

14:45~16:30 「拡散対シミュレーションと機械学習」講師 小山敏幸

16:30~17:00 質疑応答

講師：梶原正憲(東工大名誉教授), 小山敏幸(名大教授)

★テキスト：各講義の資料を、pdfファイル(pptxファイルのpdfも含む)にて配布予定です。また市販の教科書【小山敏幸：「材料設計計算工学(増補新版) — 計算組織学編一」, 内田老鶴圃, (2019).】も使用します。

(注)受講者は、上記の教科書を事前に購入されることをお勧めします。なお受講料には、上記の教科書代は含まれておりませんので、ご注意ください。

## 『状態図・相平衡・拡散の基礎』

日 時 一日目 2022年10月4日(火) 10:30～16:30  
 二日目 2022年10月5日(水) 10:30～16:30

状態図は、「材料設計の地図」とであると形容されるように、目的のマイクロ組織を得るため、製造プロセスの最適化のための重要な役割を担っています。現在では、カルファド法による状態図計算が広く行われており、多くの熱力学計算ソフトウェアや熱力学データベースが市販・公開され、材料開発に用いられています。本講座では、マイクロ組織の形成過程を理解するために必要となる状態図・相平衡・拡散理論に関してそれらの基礎から解説を行います。

### 講師：東京工業大学名誉教授 梶原正憲先生

[講師紹介] 1978年3月 東京工業大学 工学部 金属工学科 卒業；1983年3月 東京工業大学 理工学研究科 金属工学専攻 博士課程 修了；1983年4月～2020年3月 東京工業大学 工学部，総合理工学研究科および物質理工学院で教育・研究活動に従事；2020年4月～ 東京工業大学 名誉教授

### 講師：物質・材料研究機構主席研究員 阿部太一先生

[講師紹介] 1992年3月 東海大学大学院工学研究科修士課程終了，同年科学技術庁金属材料技術研究所(現物質・材料研究機構)入所。現在，同構造材料研究拠点主席研究員。この間2002-2003年スウェーデン王立工科大学客員研究員。博士(工学)。

### 講師：名古屋大学准教授 塚田祐貴先生

[講師紹介] 2007年3月名古屋大学工学部物理工学科卒業。2011年3月名古屋大学大学院工学研究科博士課程修了，博士(工学)。2011年8月名古屋工業大学工学部助教。2015年4月名古屋大学工学部助教。2016年11月より現職。

### 講師：物質・材料研究機構上席研究員 大沼郁雄先生

[講師紹介] 1993年3月 東北大学大学院工学研究科材料物性学専攻博士課程前期修了，2006年 東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻准教授，2015年 物質・材料研究機構主席研究員，2016年 グループリーダー，現在，同上席研究員。博士(工学)。

[協賛予定] 合金状態図研究会，エネルギー資源学会，金属系材料研究開発センター，素形材センター，資源・素材学会，自動車技術会，軽金属学会，日本鋳造工学会，日本塑性加工学会，日本鉄鋼協会，日本チタン協会，日本材料学会，日本材料科学会，ステンレス協会，日本アルミニウム協会，軽金属製品協会，日本ガスタービン学会，日本機械学会，日本 MRS，日本物理学会，日本化学会，電気化学会，電気学会，応用物理学会，日本セラミックス協会，日本分析化学会，粉体粉末冶金協会，日本磁気学会

参加方法 オンライン(Zoom)による講義。申込者へは3日前までに参加方法をご連絡いたします。

#### 受講料

対象者	1 講座基本料金	2 講座目以降割引料金※
正 員	20,000円	15,000円
学 生	8,000円	6,000円
非会員	40,000円	30,000円

(本会維持員会社社員，協賛学協会会員は会員扱い。学生は会員，非会員の区別なし)

※本年度および次年度開催のオンライン教育講座を複数申込される場合，2 講座目からは割引料金となります。一日目，二日目の区分ではありません。

申込締切(事前予約のみ) 2022年9月26日(月)

参加申込方法 WEB 申込 <https://www.jim.or.jp/seminersymposium/>よりお申込み下さい。

事前配布資料 事前配布資料があれば，開催3日前頃までにメール配信いたします。

受講料支払方法 ①カード決済 ②コンビニ決済 ③銀行振込

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32 (公社)日本金属学会 セミナー・シンポジウム参加係

E-mail: [meeting@jimm.jp](mailto:meeting@jimm.jp) ☎ 022-223-3685 ☎ 022-223-6312

## <プログラム>

### 一日目 10月4日(火)

- 10:30~12:00 相平衡の熱力学(1) 講師 梶原正憲  
12:00~13:15 一休 憩一  
13:15~14:45 相平衡の熱力学(2) 講師 梶原正憲  
14:45~15:00 一休 憩一  
15:00~16:00 CALPHAD 法による熱力学計算 講師 阿部太一  
16:00~16:30 質疑応答

### 二日目 10月5日(水)

- 10:30~12:00 拡散の基礎(1) 講師 塚田祐貴  
12:00~13:15 一休 憩一  
13:15~14:45 拡散の基礎(2) 講師 塚田祐貴  
14:45~15:00 一休 憩一  
15:00~16:00 平衡化法および拡散対法による状態図実験 講師 大沼郁雄  
16:00~16:30 質疑応答

★テキスト 以下の教科書、および各講義スライドの pdf ファイル(必要に応じて講義資料の pdf ファイル)を使用します。

- (1)梶原正憲：相平衡の熱力学 ―熱力学体系の理解のために―、コロナ社(2021)  
(2)阿部太一：材料設計計算工学(増補新版) ―計算熱力学編一、内田老鶴圃(2019)

(注)受講者は、上記(1)と(2)の教科書を事前に購入されることをお勧めします。なお受講料には、上記の教科書代は含まれておりませんので、ご注意ください。

## 日本金属学会オンライン教育講座

### 『材料強度の基礎』

日時 一日目 2022年10月20日(木) 13:00~16:30  
二日目 2022年10月21日(金) 13:00~16:30

本講座ではまず、(1)結晶塑性学の基盤となる転位論の基礎、(2)種々の結晶構造における転位構造の特徴とその強度特性との関係、(3)各種強化機構の基礎等について述べる。さらに材料破壊の基礎についても材料科学的な立場から論述する。そこでは、(4)材料破壊の基盤としてのクラック論基礎、(5)転位-クラック相互作用を通して破壊靱性について考える。水素脆化の問題についても触れたい。

講師：九州大学名誉教授 東田賢二先生

[講師紹介] 1975年3月京都大学工学部金属加工学科卒業、1980年3月京都大学大学院工学研究科博士課程単位取得退学、同年4月同研究科研究生、1982年6月京都大学工学部助手、1984年1月工学博士(京都大学)。1992年4月九州大学工学部材料工学科助教授、2007年1月九州大学大学院工学研究院材料工学科部門教授、2016年3月同退職(九州大学名誉教授)。同年4月国立高等専門学校機構佐世保工業高等専門学校校長、2018年4月-2020年3月国立高等専門学校機構理事(校長兼任)、2021年3月同退職(国立高等専門学校機構顧問)。同年4月九州大学鉄鋼リサーチセンター学術研究員(特任教授)、現在に至る。

[協賛予定] エネルギー資源学会、応用物理学会、金属系材料研究開発センター、軽金属学会、軽金属製品協会、合金状態図研究会、資源・素材学会、自動車技術会、ステンレス協会、素形材センター、電気化学会、電気学会、日本アルミニウム協会、日本MRS、日本化学会、日本ガスタービン学会、日本機械学会、日本材料科学会、日本材料学会、日本磁気学会、日本セラミックス協会、日本塑性加工学会、日本タタ鋼協会、日本鋳造工学会、日本鉄鋼協会、日本物理学会、日本分析化学会、粉体粉末冶金協会

参加方法 オンライン(Zoom)による講義。申込者へは3日前までに参加方法をご連絡いたします。



## 受講料

対象者	1 講座基本料金	2 講座目以降割引料金※
正員	20,000円	15,000円
学生	8,000円	6,000円
非会員	40,000円	30,000円

(本会維持員会社社員, 協賛学協会会員は会員扱い, 学生は会員, 非会員の区別なし)

※本年度および次年度開催のオンライン教育講座を複数申込される場合, 2 講座目からは割引料金となります。一日目, 二日目の区分ではありません。

申込締切(事前予約のみ) 2022年10月11日(火)

参加申込方法 **WEB 申込** <https://www.jim.or.jp/seminersymposium/>よりお申込み下さい。

事前配布資料 事前配布資料があれば, 開催 3 日前頃までにメール配信いたします。

受講料支払方法 ①カード決済 ②コンビニ決済 ③銀行振込

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 セミナー・シンポジウム参加係

E-mail: [meeting@jim.or.jp](mailto:meeting@jim.or.jp) ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

## <プログラム>

### 一日目 10月20日(木)

13:00~14:00 結晶塑性(転位論)と破壊(クラック論)との結びつき

14:00~14:15 一休 憩一

14:15~15:15 FCC, BCC, HCP 構造をもつ材料の力学特性の特徴

15:15~15:30 一休 憩一

15:30~16:30 転位論の基礎(転位の概念は何故必要か)

### 二日目 10月21日(金)

13:00~14:00 FCC, BCC, HCP 結晶における転位構造の特徴と強度特性の関係

14:00~14:15 一休 憩一

14:15~15:15 クラック論の基礎(材料科学における破壊力学の重要性)

15:15~15:30 一休 憩一

15:30~16:30 転位-クラック相互作用を通じた破壊靱性の考え方(水素脆化の特徴にも触れる)

## 日本金属学会オンライン教育講座

**New!!**

## 『金属製錬の熱力学』

日時 一日目 2022年11月17日(木)13:00~17:00

二日目 2022年11月18日(金)13:00~17:00

金属製錬は, 鉱石から酸素や硫黄, 不純物を除去して目的の金属を得る技術として, 現代社会の構築に大きく貢献してきました。資源の枯渇や地球温暖化が進み, 低品位鉱石や都市鉱山の活用が求められ, カーボンニュートラルに向けて様々な取り組みがなされる中, その重要性はさらに高まっています。

本講義では, 高温反応での乾式製錬に焦点をあて, その原理となる化学熱力学における化学ポテンシャル, 相平衡, 状態図などの基礎概念や法則について解説します。さらに, 不純物除去のためのスラグ-金属-気体間平衡反応など製錬プロセス解析への化学熱力学の活用について解説します。これらは同様に化学熱力学を活用する湿式製錬や電解精錬を学ぶ上での基礎にもなります。

講師: 東京大学名誉教授 月橋文孝先生

[講師紹介] 1977年3月東京大学工学部金属工学科卒業。1982年3月東京大学大学院工学系研究科金属工学専門課程博士課程

修了，工学博士。1982年4月東京大学工学部金属工学科助手，1986年10月東京大学講師，1988年1月東京大学助教授を経て，1999年4月東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻教授。2020年3月東京大学定年退職。2020年6月東京大学名誉教授。

[協賛予定] エネルギー資源学会，エレクトロニクス実装学会，応用物理学会，化学工学会，環境資源工学会，金属系材料研究開発センター，軽金属学会，軽金属製品協会，合金状態図研究会，資源・素材学会，自動車技術会，ステンレス協会，スマートプロセス学会，素形材センター，電気化学会，電気学会，日本アルミニウム協会，日本MRS，日本化学会，日本ガスタービン学会，日本機械学会，日本混相流学会，日本材料科学会，日本材料学会，日本磁気学会，日本伸銅協会，日本セラミックス協会，日本塑性加工学会，日本チタン協会，日本鋳造工学会，日本鉄鋼協会，日本熱物性学会，日本物理学会，日本分析化学会，日本マグネシウム協会，日本溶接協会，熱処理技術協会，廃棄物資源循環学会，粉体粉末冶金協会，溶接学会

参加方法 オンライン(Zoom)による講義。申込者へは3日前までに参加方法をご連絡いたします。

受講料

対象者	1 講座基本料金	2 講座目以降割引料金※
正員	20,000円	15,000円
学生	8,000円	6,000円
非会員	40,000円	30,000円

(本会維持員会社社員，協賛学協会会員は会員扱い。学生は会員，非会員の区別なし)

※本年度および次年度開催のオンライン教育講座を複数申込される場合，2講座目からは割引料金となります。一日目，二日目の区分ではありません。

申込締切(事前予約のみ) 2022年11月8日(火)

事前配布資料 事前配布資料があれば，開催3日前頃までにメール配信いたします。

参加申込方法 WEB 申込 <https://www.jim.or.jp/seminersymposium/>

受講料支払方法 ①カード決済 ②コンビニ決済 ③銀行振込

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 セミナー・シンポジウム参加係

E-mail: [meeting@jimm.jp](mailto:meeting@jimm.jp) ☎ 022-223-3685 ☎ 022-223-6312

<プログラム>

一日目 11月17日(木)

13:00~14:55 熱力学変数

14:55~15:05 一休 憩一

15:05~17:00 化学ポテンシャルと平衡

二日目 11月18日(金)

13:00~14:55 状態図と相平衡

14:55~15:05 一休 憩一

15:05~17:00 製錬プロセスへの適用

## 日本金属学会オンライン教育講座

### New!! 『金属材料の耐環境性(1)水溶液腐食の基礎—平衡論・速度論』

日時 一日目 2022年12月5日(月)13:00~17:00

二日目 2022年12月12日(月)13:00~17:00

近年，金属材料が使用される環境は多様化し，使用環境と金属材料の相互作用により生じる腐食・劣化現象やその要因も複雑化する傾向にあります。様々な異なる腐食の要因を把握して適切な防食対策を施すためには，腐食現象を基礎から理解することが必要とされます。本講座では水溶液が関わる腐食を理解するために不可欠な平衡論や速度論を中心とした基礎理論，ならびに鉄鋼材料や非鉄金属材料で生じる腐食の機構について学びます。

## 講師：北海道大学名誉教授 大塚俊明先生

[講師紹介] 1971年3月北海道大学工学部応用化学科卒業。1976年3月北海道大学工学博士。北海道大学助手・同大助教授・名古屋工業大学助教授を経て、1998年4月北海道大学教授。現在、北海道大学名誉教授。

## 講師：東北大学教授 武藤 泉先生

[講師紹介] 1986年3月東北大学工学部金属工学科卒業。1998年3月東北大学博士(工学)。新日本製鉄㈱研究員・新日鐵住金ステンレス㈱主任研究員・東北大学助教授・同大准教授を経て、2014年1月より現職。

## 講師：東京工業大学教授 多田英司先生

[講師紹介] 1993年3月東京工業大学工学部金属工学科卒業。1998年3月東京工業大学博士(工学)。秋田大学助手・秋田大学准教授・東京工業大学准教授を経て、2021年4月より現職。

[協賛予定] 安全工学会, 化学工学会, 火力原子力発電協会, 軽金属学会, 鋼管杭・鋼矢板技術協会, 色材学会, 資源・素材学会, ステンレス協会, 精密工学会, 石油学会, 電気化学会, 土木学会, 日本化学会, 日本ガス協会, 日本機械学会, 日本原子力学会, 日本建築学会, 日本高圧力技術協会, 日本工学会, 日本鋼構造学会, 日本材料学会, 日本伸銅協会, 日本水道協会, 日本セラミックス協会, 日本チタン協会, 日本鉄鋼協会, 日本非破壊検査協会, 日本プラントメンテナンス協会, 日本防錆技術協会, 日本溶接協会, 表面技術協会, 腐食防食学会, 溶接学会

参加方法 オンライン(Zoom)による講義。申込者へは3日前までに参加方法をご連絡いたします。

### 受講料

対象者	1 講座基本料金	2 講座目以降割引料金※
正員	20,000円	15,000円
学生	8,000円	6,000円
非会員	40,000円	30,000円

(本会維持員会社社員, 協賛学協会会員は会員扱い。学生は会員, 非会員の区別なし)

※本年度および次年度開催のオンライン教育講座を複数申込される場合、2講座目からは割引料金となります。一日目、二日目の区分ではありません。

### 申込締切(事前予約のみ) 2022年11月24日(木)

事前配布資料 事前配布資料があれば、開催3日前後までにメール配信いたします。

参加申込方法 <https://www.jim.or.jp/seminersymposium/> よりお申込み下さい。

受講料支払方法 ①カード決済 ②コンビニ決済 ③銀行振込

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 セミナー・シンポジウム参加係

E-mail: [meeting@jim.or.jp](mailto:meeting@jim.or.jp) ☎ 022-223-3685 ☎ 022-223-6312

### <プログラム>

#### 一日目 12月5日(月)

13:00~14:30 水溶液腐食の平衡論(大塚俊明先生)

14:30~14:50 一休 憩一

14:50~16:20 水溶液腐食の速度論(大塚俊明先生)

16:20~16:30 一休 憩一

16:30~17:00 質疑応答

#### 二日目 12月12日(月)

13:00~14:30 鉄鋼材料の全面腐食・局部腐食(武藤 泉先生)

14:30~14:50 一休 憩一

14:50~16:20 非鉄金属材料の腐食(多田英司先生)

16:20~16:30 一休 憩一

16:30~17:00 質疑応答

# 新 入 会 員

(2022年6月21日～2022年7月20日)

## 正 員

井上 謙一	田中貴金属工業株式会社	竹原万莉那	JFEスチール株式会社	松尾 哲司	京都大学
川村 史朗	国立研究開発法人物質・材料 研究機構	田中 智大	富士通株式会社	眞部 弘宣	日本電子株式会社
北川 真也	本田技研工業株式会社	仲川 枝里	国立研究開発法人物質・材料 研究機構	遊佐 齊	国立研究開発法人物質・材料 研究機構
栗田 陽一	株式会社クリタ	仲沢 達也	田中貴金属工業株式会社	吉岡 謙	吉岡技術士事務所
佐久間穂崇	東静工業株式会社	藤原 比呂	九州大学	吉田 智	東ソ一株式会社
鈴木慎太郎	東京理科大学	星野 智之	東邦亜鉛株式会社	李 燕	大阪大学
高橋 菜保	ユニチカ株式会社	堀内 潤	JFEスチール株式会社		

## 学 生 員

青木 翼	名古屋大学	大澤 周平	名古屋工業大学	久米 望介	富山大学
赤石 幸起	鹿児島大学	大澤 史哉	愛媛大学	倉林 康太	東北大学
秋元 佑作	名古屋工業大学	大島 董	愛媛大学	栗野 晃一	九州大学
安達 隼介	九州大学	大須賀脩介	東京大学	伍 沢 西	大阪大学
足立 龍斗	弘前大学	大谷 樹生	芝浦工業大学	小嶋 優輔	金沢大学
安彦 祐輝	群馬大学	大谷 祐貴	名古屋大学	小杉 静花	大阪大学
天池 友哉	金沢大学	大塚 祥人	芝浦工業大学	兒玉 涼	熊本大学
雨宮 直輝	東京大学	小笠原 遼	東北大学	小西陽一郎	金沢大学
新井 佑梨	東北大学	岡田 雄司	東京工業大学	小林 正人	福岡工業大学
荒内 隆誓	大阪府立大学	岡田 柚実香	大阪大学	是永 琢斗	名古屋大学
有賀 才貴	東京工業大学	沖 能 瑠	熊本大学	近藤 謙太郎	九州大学
阿波 千寛	北海道大学	奥山 勇輝	福岡工業大学	蔡 嗣 閣	大阪府立大学
安藤 空我	九州工業大学	小田 健太	富山大学	嵯峨 功大	大同大学
家氏 優行	大阪大学	男澤 桜子	岩手大学	嵯峨山 葵	関西大学
五十嵐 壮太	東北大学	小野 晃生	東京工業大学	佐々木 達也	関西大学
井口 颯太	大阪大学	小山 真里奈	群馬大学	佐瀬 浩平	東京大学
石川 蓮太	名古屋工業大学	小山 裕也	弘前大学	眼目 健翔	北海道大学
石原島 弘明	長岡技術科学大学	恩田 真	芝浦工業大学	佐藤 祥太郎	室蘭工業大学
泉 隆 博	九州工業大学	Kaiyuan YAO	大阪大学	佐藤 幹	北海道大学
磯村 龍一	東京工業大学	加賀 考成	滋賀県立大学	佐藤 祐	北海道大学
市瀬 浩将	東京工業大学	片桐 大智	東北大学	佐藤 悠然	関西大学
伊藤 耕太郎	東京工業大学	片山 遥	熊本大学	柴田 聖大	弘前大学
伊藤 栞子	名古屋工業大学	片山 里南	東京工業大学	芝本 健志	大阪大学
伊東 祐斗	東京大学	加藤 淳也	東海大学	清水 憩	群馬大学
糸山 森羅	九州大学	加藤 有真	名古屋大学	清水 健太郎	東京工業大学
稲葉 太郎	名古屋大学	金原 生奈	芝浦工業大学	清水 雄太	九州大学
稲村 岳士	金沢大学	鎌田 龍介	東海大学	清水 友斗	北海道大学
井上空 詩	広島大学	粥川 俊介	名古屋大学	清水 峻雅	神戸大学
井上 格	兵庫県立大学	刈部 健太郎	東京都立大学	下村 昌輝	九州大学
岩崎 宗将	芝浦工業大学	河内 玲奈	大阪大学	庄子 智明	東北大学
岩崎 将成	九州工業大学	川津 孝介	九州大学	白木 翔大	中部大学
岩田 健史	東京大学	川鍋 涉	群馬大学	白土 泰裕	北海道大学
於 華 萌	京都大学	河邊 巧直	芝浦工業大学	神宮 輝	神戸大学
上田 佑理	東京工業大学	姜 信 英	東北大学	鈴木 海渡	長岡技術科学大学
漆間 元貴	東京医科歯科大学	菊地 凌太	芝浦工業大学	鈴木 華音	仙台高等専門学校
江面 じゅん	富山大学	北上 真幸	大阪大学	鈴木 駿介	愛知工業大学
遠藤 七洋	東京工業大学	北野 亘	関西大学	鈴木 敬康	東京工業大学
遠藤 守琉	東京大学	金 庚 民	大阪大学	鈴木 弓景	名古屋大学
大江 弘拳	北海道大学	木村 光貴	芝浦工業大学	鈴木 涼介	京都工芸繊維大学
大川 裕輝	東北大学	木山 智輝	九州大学	鈴木 勇介	東京工業大学
大串 一真	大阪大学	日馬 真夏	芝浦工業大学	競芭 裸就	馬廼米 螺兒 盈 弛无 広島 大学
大栗 洋人	大阪大学	久慈 聖太	岩手大学	千藤 翼	北海道大学
大崎 翔太郎	富山県立大学	國吉安太郎	東京工業大学		

高島 充希	富山県立大学	西尾 拓哉	大阪公立大学	堀口 真輝	大阪大学
高島 良	神戸大学	西岡 彪吾	宇部工業高等専門学校	本田 有作	東北大学
高田 悠介	芝浦工業大学	西口ありさ	京都大学	松井 祐弥	北見工業大学
田口 貴哉	金沢大学	西野 紗衣	茨城大学	松下 雄介	大阪大学
竹内 彰汰	室蘭工業大学	沼倉 恭平	岩手大学	松田 貴大	熊本大学
竹内 友哉	神戸大学	野田 幸伸	神戸大学	松田 幹大	東京大学
武田 良樹	名古屋大学	野々村俊希	群馬大学	松田 陸	大阪市立大学
多田 陸人	東北大学	羽切 颯汰	芝浦工業大学	松盛 光敏	芝浦工業大学
辰島 諒	北海道大学	橋本 航	東北大学	満江 茉由	九州工業大学
田中 嵩純	名古屋大学	畑 勇氣	東京大学	三戸陽奈太	宇部工業高等専門学校
田中 宏季	東京工業大学	畑中辰汰朗	東北学院大学	南 達哉	北海道大学
田中 陸平	大阪大学	八田 佳剛	芝浦工業大学	美野輪光樹	東北大学
谷口 航平	関西大学	早野 彩夏	北海道大学	宮川 靖弥	東京工業大学
田畑 浩大	東京大学	原 聖也	秋田大学	村井田拓希	長岡技術科学大学
田原 千大	九州工業大学	春名 瞭平	大阪大学	室津 陽香	千葉工業大学
丹羽 侑希	熊本大学	韓 東瑾	東京工業大学	奎谷 成道	九州工業大学
趙 艶華	大阪大学	半田 俊喜	東京工業大学	持丸 駿哉	東北大学
辻口 隼人	富山大学	比嘉 良太	九州大学	森 千紘	東京工業大学
土部 慶	大阪大学	疋田 直規	名古屋工業大学	森 雄志	関西大学
恒川 開	大阪大学・工	肥田 輝	近畿大学	森下 泰智	名古屋工業大学
寺崎 保裕	大阪府立大学	日野 聖人	名古屋工業大学	柳 和弥	京都大学
戸崎 烈	東北大学	百歩 明	大阪大学	山本 和輝	名古屋工業大学
富永 隼矢	兵庫県立大学	檜 山 快	東北大学	山本健太郎	京都大学
内藤 拓人	三重大学	平 柝 健太	千葉工業大学	横江 翼	東北学院大学
仲田 玲	東北大学	福澤 颯太	北海道大学	横田 尚也	東北大学
中出 大晴	関西大学	福島 幸大	北海道大学	吉田 圭吾	九州大学
中村 太輔	金沢大学	福本 圭祐	北海道大学	吉田 壮太	東北大学
中村 弘和	大阪大学	藤井 謙成	北海道大学	吉竹 巧	長岡技術科学大学
中元 航太	鹿児島大学	藤原 孝哉	熊本大学	林 學毅	北海道大学
中山 恵	芝浦工業大学	藤本 隆誠	兵庫県立大学	王 貞元	東京大学
七海 詩音	東北大学	藤原 陸	九州大学	若井 颯音	京都大学
名波 拓馬	名古屋大学	船崎隆史郎	九州大学	和田 眞弥	豊橋技術科学大学
成川 皓泰	名古屋工業大学	侯 林 楓	大阪大学	渡部 樹	群馬大学
成瀬 卓弥	京都大学	細川 智哉	大阪大学	渡邊 未来	東北大学
新妻 佑斗	東北大学	堀井 雄斗	大阪公立大学	渡辺 岬	芝浦工業大学
新野 拓夢	北海道大学	堀江 典	京都大学		

#### 外国一般会員

Issariyapat Ammarueda 大阪大学  
RATANAPONGPIEN Kanawat 金沢大学

ナンダール ヴィッキー  
国立研究開発法人物質・材料研究機構

朴 廣宰 AIST

#### 外国学生会員

LIM SUNGLOCK 大阪大学  
NGUYEN Thi Huong 長岡技術科学大学  
PETERSON Jack 大阪大学  
Qarooni Abdulwahab 東京大学  
RATANAPONGPIEN Kanawat 金沢大学  
RODRIGUEZ Adrian 帝京大学  
SHEN Yu 東京大学  
顔 紹宇 国立研究開発法人物質・材料  
研究機構

敵 靖園 東京大学  
陀仁獲 陀仁獲 帝京大学  
GONG Shuang 東京大学  
ケイコ ウィディヤニサ 東京工業大学  
孔 奇 東京大学  
孫 浩田 北海道大学  
ZHU Xinzhe 物質材料研究機構  
税 翔 静岡大学  
SONG YUXIN 東北大学

陳 紅新 広島大学  
陳 宇聰 千葉工業大学  
Pham Thai Anh 群馬大学  
黄 晋賢 東北大学  
明 祖 東北大学  
楊 凡 東北大学  
李 卓航 九州大学



日本金属学会誌掲載論文

Vol. 86, No. 9 (2022)

—オーバービュー—

Ni 基単結晶超合金のラフト組織

齊藤拓馬 原田広史 横川忠晴 大澤真人  
川岸京子 鈴木進補

—論文—

パラジウム電析膜中に共析した水素の存在状態解析

橋本倫也 中村友哉 福室直樹 八重真治

電析ナノ結晶 Ni 合金の超塑性接合

兼山 凱 瀧川順庸

Ti-6Al-4V 合金のアルゴンイオンスパッタエッチングによる微細孔および微細突起物の形成

中佐啓治郎 高 三徳 久保 隆 北御門雄大 李木経孝

Materials Transactions 掲載論文

Vol. 63, No. 9 (2022)

—Regular Article—

Microstructure of Materials

Formation and Dispersion of Precipitates during Hot Deformation in Al-1%Mn Alloys

Hiroki Tanaka, Katsuhiko Sasaki and Shinji Tateyama

Investigation of Nanoscale Phase Formation in Rapidly Solidified Fe<sub>20</sub>Co<sub>20</sub>Ni<sub>20</sub>Cr<sub>20</sub>B<sub>20-x</sub>Si<sub>x</sub> Alloys

Yicheng Zhang, Koji Inoue, Manabu Ishimaru, Tatsuya Tokunaga and Hidenori Era

Mechanics of Materials

Analysis of Concentration Dependence of Interdiffusion Coefficient under the Condition of a Time-Varying Surface Concentration

O. Olaye and O. A. Ojo

Synergistic Effect of Different Plastic Deformation Modes: Molecular Dynamics Study on Strength of Crystalline/Amorphous Mixed Systems

Tomotsugu Shimokawa, Kazuki Hara and Tomoaki Niiyama

Crack Tip Deformation during Dwell Fatigue and Its Correlation with Crack/Fracture Surface Morphologies in a Bi-Modal Ti-6Al-4V Alloy

Yuma Aoki, Motomichi Koyama, Masaki Tanaka and Kaneaki Tsuzuki

Materials Processing

Improvement of Corrosion Resistance of the AZ91 Magnesium Alloys with Sputtered Aluminum Layer Using Interdiffusion Treatment, Anodic Oxidation Treatment and Sealing Process

Masahiko Hatakeyama, Kenichi Nakano, Ryosuke Yoshita, Daichi Nakato, Satoshi Sunada and Masateru Nose

Effect of Large Particles in Central Band of Al-4%Mn-1%Si High-Speed Twin-Roll Cast Strip on Elongation of Cold-Rolled and Annealed Sheets

Thai Ha Nguyen, Ram Song, Yohei Harada, Shinji Muraishi and Shinji Kumai

Solute Distribution of  $\alpha$ -Al Dendrite in Al-Si and Al-Cu Binary Aluminum Alloys during Solidification and Cooling Process

Takuma Minoura, Jun Yaokawa, Hiroaki Iwahori, Yuko Aoki, Mina Iwai, Shuxin Dong and Yasushi Iwata

Engineering Materials and Their Applications

Ionic Conductivity of Ca<sup>2+</sup> Doped NaI-LiI Solid Electrolyte and Its Stability with Li Metal

Reona Miyazaki, Takamasa Hirai and Takehiko Hihara

Effects of Sulfur and Phosphorus on Binder Decomposition Behavior of Nickel Powder

Seiyu Teruya, Noritaka Saito and Kunihiko Nakashima

Effect of Binder Chemistry on Dynamic Percolation in Electrically Conductive Carbon-Nanotube-Filled Pastes during Curing

Subaru Tsujimura and Masahiro Inoue

Environment

pH Dependence of Scorodite Formation in As(V) Solution Using Magnetite as the Solid Iron Source

Ken Adachi, Takumi Anezaki, Tomoro Karube, Atsushi Iizuka and Etsuro Shibata

Announcement

まてりあ 第61巻10号 予告

特集「結晶欠陥に形成される「機能コア」研究の最前線」

〔最近の研究〕非磁性半導体 FeSi における強磁性金属表面の発現とスピンオービトロニクス機能

……………東大 金澤直也 平山元昭

〔講義ノート〕平面波基底の第一原理計算法(第二回)

……………産総研 香山正憲

〔実学講座〕1-7 透過型電子顕微鏡を用いた組織観察(続き)

……………名大 山本剛久

—他—

—編集の都合により変更になる場合もございます—

# 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	問合せ先	締切
<b>2022年9月</b>				
2, 9, 16, 30	関西支部第26回塑性加工基礎講座「金属薄板の成形性試験」(京都工芸繊維大)	日本塑性加工学会 関西支部	TEL 090-9280-0383 kansai@jstp.or.jp	8.12
4~8	第18回アルミニウム合金国際会議(ICAA18)(富山)	軽金属学会	http://www.icaa18.org/	
4~9	第18回液体及びアモルファス金属国際会議(LAM18)(広島)	第18回液体及びアモルファス金属国際会議組織委員会	TEL 082-424-6555 masinui@hiroshima-u.ac.jp https://lam-18.hiroshima-u.ac.jp/	
5~6	第16回水素若手研究会(琉球大)	水素若手研究会	hydrogen.wakate@gmail.com https://sites.google.com/view/hydrogen-wakate/	
6~8	2022年度資源・素材関係学協会合同秋季大会(福岡工大)	資源・素材学会	TEL 03-3402-0541 info@mmij.or.jp https://confit.atlas.jp/guide/event/mmij2022b/top?lang=ja	
7~9	2022年度工学教育研究講演会(関東地区大学とWeb開催)	日本工学教育協会	TEL 03-5442-1021 kawakami@jsee.or.jp https://www.jsee.or.jp/event/conference/	
9	第102回レアメタル研究会(東大生産技研/Web開催)(7号459頁)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html	
11~13	第16回プラズマエレクトロニクス・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	TEL 0143-46-5560 ktakahashi@mmm.muroran-it.ac.jp http://annex.jsap.or.jp/plasma/PE_files/PE_SS_2022	定員 60名
11~16	The 22nd International Vacuum Congress(IVC-22)(札幌)	日本表面真空学会 日本学術会議	TEL 03-3812-0266 ivc22@jvss.jp https://ivc22.org/	
14~16	日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム(徳島大)	日本セラミックス協会	TEL 03-3362-5232 fall35@ceramic.or.jp https://fall35.ceramic.or.jp/	
16	第109回 アノード酸化皮膜の機能化部会(ARS)例会—2022年度チュートリアル:アノード酸化の基礎—(オンライン開催)	表面技術協会・金属のアノード酸化皮膜の機能化部会	TEL 079-267-4911 yae@eng.u-hyogo.ac.jp http://ars.sjf.or.jp/	
20~23	日本金属学会秋期講演大会(福岡工業大学)(本号600頁)(懇親会/ランチョンセミナー/展示会)	日本金属学会	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jimm.jp</b>	参加予約 9.2
23	日本金属学会・日本鉄鋼協会第11回女性会員のつどい(福岡工業大学)(本号604頁)	日本金属学会・日本鉄鋼協会	<b>TEL 022-223-3685</b>	
25~26	SPring-8 シンポジウム2022(兵庫)	SPring-8 ユーザー協団体(SPRUC)他	TEL 0791-58-2785 sp8sympo2022@spring8.or.jp http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2022/sp8sympo2022/	
28	日本金属学会秋期講演大会第8回「高校生・高専学生ポスターセッション」(オンライン開催)(7号448頁)	日本金属学会	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jimm.jp</b>	7.15
28~29	KISTEC 教育講座「“つける”と“はがす”の新技術—分子接合と表面制御コース」(川崎)	神奈川県立産業技術総合研究所	TEL 044-819-2033 manabi@kistec.jp https://www.kistec.jp/learn/researcher/molecular-bonding/	
29~30	第54回溶融塩化学討論会(岩手大学+オンライン)	電気化学会溶融塩委員会	TEL 019-621-6340 ms54.electrochem@gmail.com https://msc.electrochem.jp/touron.html	
30	第347回塑性加工シンポジウム「高強度材料の成形と高精度成形」(オンライン開催)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 80名
<b>2022年10月</b>				
4	第21回日本金属学会東北支部研究発表大会(日大)(本号607頁)	東北支部	<b>TEL 022-795-7324 tohoku@jimm.jp</b>	参加 9.30正午
4~5	オンライン教育講座(状態図・相平衡・拡散の基礎)(オンライン開催)(本号615頁)	日本金属学会	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jimm.jp</b>	9.26
6~7	第44回安全工学セミナー(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com https://www.jsse.or.jp/	
6~7	金属学会セミナー(特別講座)「拡散解析:基礎から最先端へ」(オンライン開催)(本号614頁)	日本金属学会	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jimm.jp</b>	9.26
7	第73回白石記念講座—攻めの操業を支えるシステムレジリエンス—環境の揺らぎへの対応力—(早稲田大)	日本鉄鋼協会	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/	
11	腐食防食部門委員会 第344回例会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimu@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	9.30
11~12	第5回EBSD法による損傷評価講習会(京都+オンライン)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimu@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	9.9
11~14	第57回真空技術基礎講習会(和泉市)	日本表面真空学会	TEL 03-3812-0266 office@jvss.jp https://www.jvss.jp/jpn/activities/18/detail.php?eid=00004	

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合せ先	締切
11~14	第8回材料 WEEK(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jim@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	
12	2022年度 溶接工学専門講座(大阪大)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	10.5
12~13	第40回初心者のための疲労設計講習会(京都+オンライン)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jim@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	
12~13	第50回日本ガスタービン学会(九大)	日本ガスタービン学会	gtsj-office@gtsj.or.jp https://www.gtsj.or.jp/	
12~14	ADMETA Plus 2022(Advanced Metallization Conference 2022: 31st Asian Session)(東大/オンライン)	応用物理学会	TEL 03-5821-7120 jimukyoku@admeta.org http://www.admeta.org/	
13	第17回フラクトグラフィシンポジウム(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 fractosym@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	
14~16	日本銅学会第62回講演大会(仙台)	日本銅学会	TEL 03-6803-0587 dou-gakkai@copper-brass.gr.jp http://copper-brass.gr.jp/society/6095	
16~21	ALC'22 (14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices, '22)(沖縄)	日本表面真空学会	TEL 03-3812-0266 alc@jvss.jp https://www.jvss.jp/division/mba/alc/alc22/	
19	2022年度日本セラミックス協会 資源・環境関連材料部会講演会「エネルギーの未来の話をしよう」(オンライン開催)	日本セラミックス協会	sakamoto@fitc.pref.fukuoka.jp https://www.ceramic.or.jp/bgenryo/index_j.html	
19~21	第41回電子材料シンポジウム(EMS41)(榎原)	電子材料シンポジウム運営委員会	TEL 03-5841-3840 kazu-n@g.ecc.u-tokyo.ac.jp https://ems.jpn.org/	
20~21	オンライン教育講座(材料強度の基礎)(オンライン開催)(本号616頁)	日本金属学会	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312</b> <b>meeting@jimm.jp</b>	<b>事前 10.11</b>
20~21	第35回疲労シンポジウム(名護)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jim@office.jsms.jp http://www.fatigue.jsms.jp/	
25	第238回研究会「マテリアルズインフォマティクスの進展と磁性材料への応用」(オンライン開催)	日本磁気学会	TEL 03-5281-0106 msj@bj.wakwak.com https://www.magnetics.jp/event/topical_238/	
25~27	第43回日本熱物性シンポジウム(和歌山)	日本熱物性学会	TEL 086-251-8046 jstp@okayama-u.ac.jp http://jstp-symp.org/symp2022/	
27~28	第31回 傾斜機能材料シンポジウム(岩崎)	傾斜機能材料研究会	https://fgms.net/	参加 9.26
29	日本機械学会関東支部山梨講演会(山梨大)	日本機械学会関東支部	TEL 055-220-8161 http://society.me.yamanashi.ac.jp/jsme/2022/	
31	第51回 薄膜・表面物理 基礎講座(2022) Beyond 5G と薄膜・表面物理の接点(ハイブリッド開催)	応用物理学会 薄膜・表面物理分科会	TEL 03-3828-7723 divisions@jsap.or.jp https://annex.jsap.or.jp/tfspd/kiso2022/	
31~11.1	第176回塑性加工工学講座「板材成形の基礎と応用～基礎編～」(東京)	日本塑性加工学会	https://www.jstp.or.jp	定員 50名
<b>2022年11月</b>				
1	第18回 SPring-8 金属材料評価研究/第80回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ(オンライン開催)	SPring-8 利用推進協議会他	suishin@spring8.or.jp http://www.jasri.jp/iuss/research_activity/2022/221101.html	
4	第53回 エンジニアリングセラミックスセミナー「セラミックスの信頼性向上に貢献するシミュレーション技術」(東大)	日本セラミックス協会	encera@cersj.org http://www.ceramic.or.jp/bkouon/index_j.html	定員 100名
4	第103回レアメタル研究会(チタン関係シンポジウム)(東大生産技研/オンライン開催)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html	
6~10	機械材料・材料加工国際会議2022(沖縄)	日本機械学会	TEL 03-4335-7615 https://www.jsme.or.jp/	
7	第245回西山記念技術講座「失敗しない評価・分析・解析技術の最前線(不確定要素の理解と適切な手法の選択に向けて)」(大阪)	日本鉄鋼協会	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://isij.or.jp/event/event2022/nishiyama245.html	
7~9	第43回 超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム(同志社大)	超音波エレクトロニクス協会	TEL 042-443-5166 h.nomura@uec.ac.jp https://www.use-jp.org/	
8	2022年度 溶接工学企画講座(大阪大)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	11.1
9	日本希土類学会第40回講演会(横浜)	日本希土類学会	TEL 06-6879-7352 kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp http://www.kidorui.org/lecture.html	10.19
10~11	第58回 X線分析討論会(姫路)	日本分析化学会 X線分析研究懇談会	TEL 079-267-4005 nozaki@eng.u-hyogo.ac.jp https://xbun.jsac.jp/conference/no58.html	

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合せ先	締切
11	第24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/	
11~12	オータムスクール2022「非線形有限要素法による弾塑性解析の理論と実践」(中央大)	日本計算工学会	TEL 03-3868-8957 office@jsces.org http://www.jsces.org/	参加 10.31
11~13	軽金属学会第143回秋期大会(東工大)	軽金属学会	https://www.jilm.or.jp/	事前 10.7
14	第246回西山記念技術講座「失敗しない評価・分析・解析技術の最前線(不確定要素の理解と適切な手法の選択に向けて)」(東京)	日本鉄鋼協会	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://isij.or.jp/event/event2022/nishiyama243.html	
15~16	第44回安全工学セミナー(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com https://www.jsse.or.jp/	
16~18	第35回計算力学講演会(Web開催)	日本機械学会	https://confit.atlas.jp/cmd2022	
17~18	オンライン教育講座(金属製錬の熱力学)(オンライン開催)(本号617頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jimm.jp	11.8
22~25	The 1st International Symposium on Iron Ore Agglomerates (SynOre2022)(第1回鉄鉱石塊成鉱に関する国際シンポジウム)(島根)	SynOre2022 組織委員会, 日本鉄鋼協会	TEL 03-6369-9984 synore2022@issjp.com https://synore2022.com/index.html	
24~25	研究集会“微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング”2022(徳島)(本号607頁)	研究会 No. 82	micromech_jim@nims.go.jp http://nims.nims.go.jp/group/sdg/micromech-jim/	11.11
24~25	電気加工学会全国大会(2022)(名工大)	電気加工学会	TEL 052-712-2323 Ukai.Yoshikazu@aj.MitsubishiElectric.co.jp http://www.jseme.or.jp/	
25	オータムスクール2022「非線形有限要素法による弾塑性解析の理論と実践」(中央大)	日本計算工学会	TEL 03-3868-8957 office@jsces.org http://www.jsces.org/	参加 10.31
<b>2022年12月</b>				
1~2	2022年度粉末冶金入門講座Ⅱ(ハイブリッド開催)	粉体粉末冶金協会	TEL 075-721-3650 info@jspm.or.jp https://www.jspm.or.jp/	11.10
5, 12	オンライン教育講座(金属材料の耐環境性(1)水溶液腐食の基礎-平衡論・速度論)(オンライン開催)(本号618頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 meeting@jimm.jp	11.24
6~8	第48回固体イオニクス討論会(仙台)	日本固体イオニクス学会	TEL 022-217-5832 ssij48@grp.tohoku.ac.jp https://www.ssi-j.org/symp/ssij48/	
7~9	第49回炭素材料学会年会(姫路)	炭素材料学会	tanso-desk@conf.bunken.co.jp http://www.tanso.org/contents/event/conf2022/index.html	
8~9	第37回分析電子顕微鏡討論会(オンライン)	日本顕微鏡学会	TEL 092-802-2971 http://zaiko13.zaiko.kyushu-u.ac.jp/	11.30
13~15	第63回高压討論会(立命館大)	日本高压力学会	TEL 070-5545-3188 jimu@highpressure.jp http://www.highpressure.jp/new/63forum/	参加事前 11.16
<b>2023年1月</b>				
6 or 13	第104回レアメタル研究会(貴金属シンポジウム)(東大生産技研/オンライン開催)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html	
7~8	第61回セラミックス基礎科学討論会(岡山大)	日本セラミックス協会基礎科学部会	kishim-a@cc.okayama-u.ac.jp	
26~27	第44回安全工学セミナー(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com https://www.jsse.or.jp/	
<b>2023年3月</b>				
10	第105回レアメタル研究会(東大生産技研/Web開催)	レアメタル研究会	TEL 03-5452-6314 tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html	
21~24	日本金属学会春期講演大会	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jimm.jp	
<b>2023年9月</b>				
25~30	ITC Fukuoka 2023 (9th International Tribology Conference, Fukuoka 2023)(福岡)	日本トライボロジー学会	TEL 03-3434-1926 https://www.itc2023.jp/	

まてりあ 第61巻 第9号(2022) 発行日 2022年9月1日 定価1,870円(本体1,700円+税10%)送料120円

発行所 公益社団法人日本金属学会

〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32

TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312

発行人 山村英明

印刷所 小宮山印刷工業株式会社

発売所 丸善雄松堂株式会社

〒160-0002 東京都新宿区四谷坂町10-10

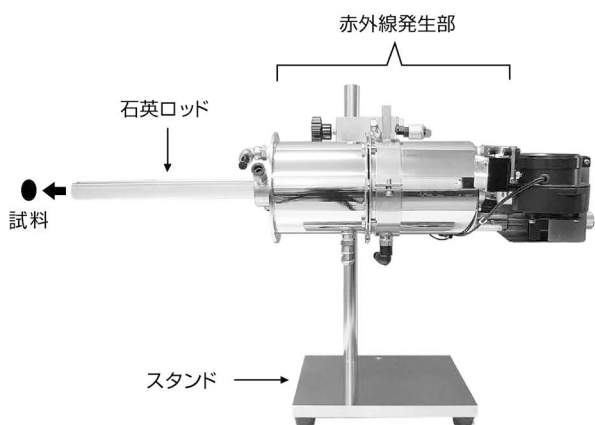


# 超高温・高速昇温・真空・ガス雰囲気中試料の加熱に!

## 赤外線ポイント加熱装置 GA 298

石英ロッド先端より赤外線ビームを試料に照射・昇温。  
周りを加熱しないポイント加熱。  
磁場中、回転中、熱衝撃試験試料の非接触加熱。

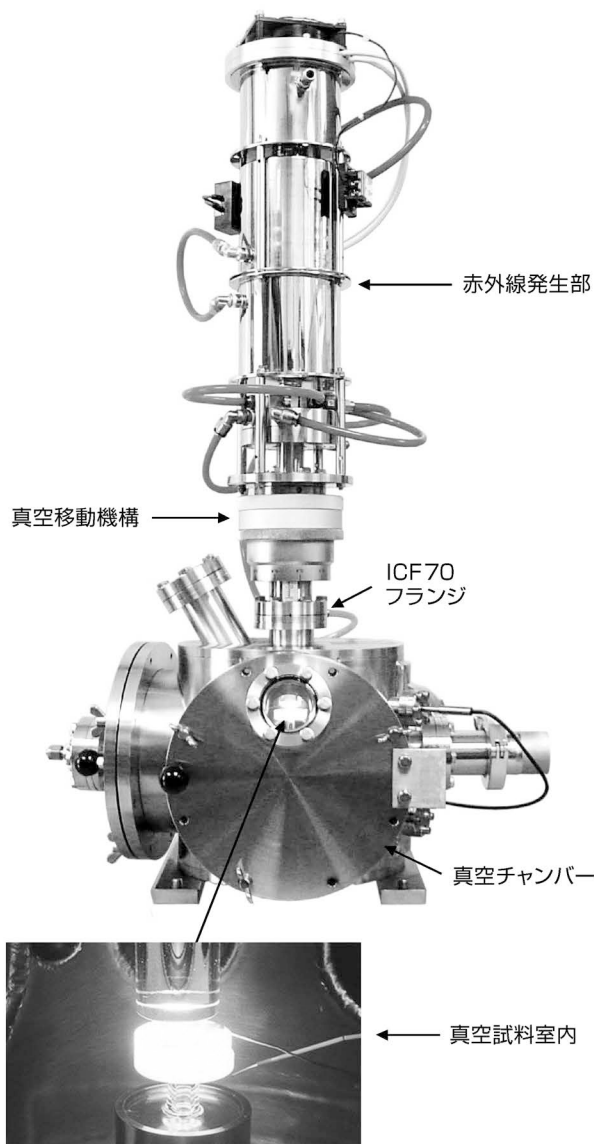
- ◆最高到達温度: 1500°C ◆加熱面積: φ20mm以内
- ◆ランプ最大定格: 2kW



## 赤外線導入加熱装置 GVL 298

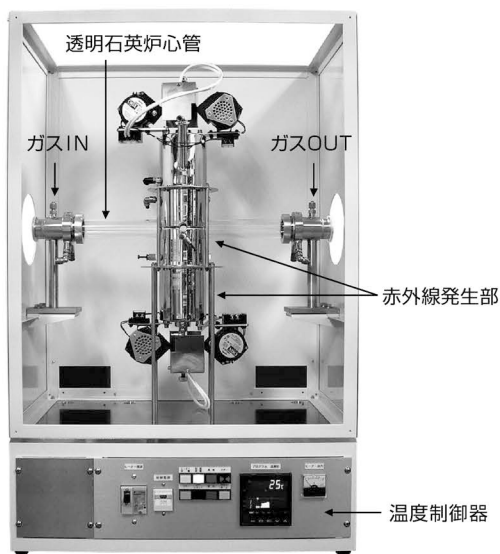
高真空中試料の超高速昇温。クリーン加熱が可能。  
真空チャンバー前面扉の開閉により、試料の出し入れ可能。

- ◆1500°Cまで1分で昇温。
- ◆周りを加熱せず試料のみクリーン加熱。
- ◆熱源と試料は非接触。強制冷却も可能。
- ◆XPS等、研究室内真空システムに取付可能。



## 対面照射式 赤外線真空炉 IVF 298CV

- ◆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°C



熱と共に40年

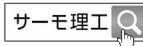
株式会社 サーマ理工

〒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

<https://www.thermo-r.co.jp/>



HP・製品詳細



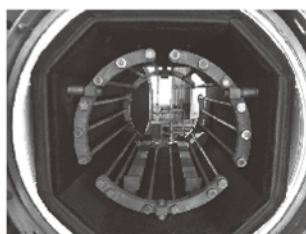


# 高断熱+省エネ

URL:<http://www.mechanical-carbon.co.jp/>

- 高純度カーボングラファイト部品(純度5ppm以下)
- C/C(カーボン・カーボン)材による精密加工
- カーボン成形断熱材、カーボンフェルト
- 回転式アルミ脱ガス装置用ローター
- 高温真空炉 炉内メンテナンス、カーボンヒーター
- メカニカルシール、パッキン等の摺動部品修理・改造

高温真空炉



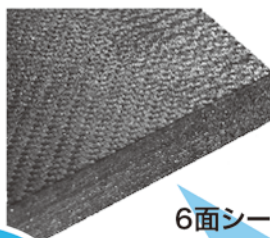
カーボンヒーター



シール



6面シート  
貼り



カーボンフェルト



## CO<sub>2</sub>削減



## メカニカルカーボン工業株式会社

本社:247-0061 神奈川県鎌倉市台5-3-25 TEL.0467-45-0101 FAX.0467-43-1680

工場:新潟工場・本社工場・野村工場(愛媛)・広見工場(愛媛) 事業所:郡山・東京・大阪・松山・周南・福岡

お問い合わせEメール [mck@mechanical-carbon.co.jp](mailto:mck@mechanical-carbon.co.jp)



# 日本金属学会発行誌 広告のご案内

## まてりあ (会報)

前付) 1色1P ¥100,000 (税別) 1/2P ¥60,000 (税別)

後付) 1色1P ¥95,000 (税別) 1/2P ¥55,000 (税別)

※表紙回り、カラー料金等お問い合わせ下さい。

## 春・秋期講演大会プログラム

後付) 1色1P ¥70,000 (税別) 1/2P ¥40,000 (税別)

広告ご掲載についてのお問い合わせ・お申込み

株式会社 明 報 社

〒104-0061 東京都中央区銀座7-12-4 友野本社ビル

TEL (03) 3546-1337 FAX (03) 3546-6306

E-mail [info@meihosha.co.jp](mailto:info@meihosha.co.jp) HP [www.meihosha.co.jp](http://www.meihosha.co.jp)



貴金属がもたらす  
ゆとりある豊かな社会の実現へ

近代から現代に至るまで、  
産業の発達を根底から支え続ける貴金属。  
これからも新しい領域を拓いていきます。  
あなたのチャレンジをサポートします。

## 募集 2022年度 貴金属に関わる研究助成金

貴金属が関係している  
テーマであれば応募可能

助成金は奨学寄附金  
扱いになります

研究や成果を  
拘束することはありません

### 募集要項

田中貴金属記念財団では、「貴金属が拓く新しい世界」に向けて、  
貴金属が貢献する新しい技術や製品の実用化に向けた研究・開発テーマを募集いたします。

応募資格 国内の教育機関あるいは公的研究機関に所属  
されている方

募集期間 2022年9月1日(木)~2022年11月30日(水)

研究助成金  
プラチナ賞 500万円 (1件)  
ゴールド賞 200万円 (1件)  
シルバー賞 100万円 (4件)  
萌芽賞※ 100万円 (2件)  
奨励賞 30万円 (複数件)

※2022年4月1日現在で37歳以下の方が対象となります。

主催者 一般財団法人 田中貴金属記念財団

お問い合わせ先 「貴金属に関わる研究助成金」事務局  
E-mail:joseikin@ml.tanaka.co.jp

〒100-6422  
東京都千代田区丸の内2-7-3  
東京ビルディング 22階  
田中貴金属工業株式会社  
新事業開発統括部 企画推進S 内

田中貴金属記念財団

詳細はこちら▶ <https://tanaka-foundation.or.jp>

