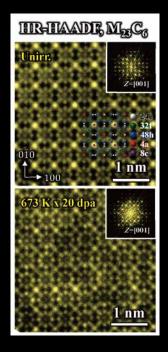
Material Japan No.3







- 金属素描
- 「原子力材料研究の最前線」
- 金属腐食の概要と局部腐食 ||| ~腐食の局所化~
- ・熱力学過剰量に基づく新たな金属溶液論の展開
- ・思い出の教科書、この一冊!

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、ダイアモンド、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、セ関亜鉛鉱、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 Phycical 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式の立体表示
- ■ユーザーデータベースの作成



システムブラットフォーム: 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)

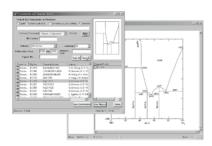
Version 4.1/4.2/4.3/4.4/4.5からのアップグレード価格あり (¥160,000~¥50,000)

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)
 ■ブニチド類(第15族元素) ■炭化物類、炭酸塩類、ケイ化物類、ケイ酸塩類
 ■アクチニドおよび希土類 ■セミコンダクター ■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、このパージョンではJAVAは不要です。



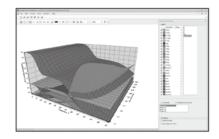
システム要件: Windows 7~10、2GB RAM、ディスク空き容量4GB 媒体: USB

化学反応/平衡計算ソフトウエア

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(プールベ)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。



システムブラットフォーム: Windows /8/10 (Outototec Research Oy. 製作)

※表記の価格は税込です。

姓 ディ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

https://www.jim.or.jp/journal/m/

Vol.62 No.3

金属素描	No. 27 銀(Silver) 池田大亮
	特集「原子力材料研究の最前線」
	企画にあたって 山本知一 ·······153
	ウィーク・ビーム走査透過電子顕微鏡法を用いた原子炉圧力容器鋼のマトリック
	入損傷評価 吉田健太 外山 健 井上耕治 永井康介 下平昌樹 ·············154
	原子力材料中における第二相粒子の照射下相安定性 叶野 翔 楊 会龍 阿部弘亨
	原子炉用低放射化ハイエントロピー合金の開発研究 岡 弘 橋本直幸164
	高速重イオン照射誘起によるスピネル構造酸化物中欠陥のシンクロトロン X 線解析 吉岡 聰 安田和弘
	機械学習分子動力学法による核燃料物質の高温物性評価 小林恵太 中村博樹 板倉充洋 町田昌彦 奥村雅彦175
新進気鋭	熱力学過剰量に基づく新たな金属溶液論の展開 渡邉 学182
講義ノート	金属腐食の概要と局部腐食 Ⅲ~腐食の局所化~ 篠原 正187
	腐食損傷が問題となる事例の多くは、腐食が局所化し不均一に進む場合である。腐食が均一に進む場合と比較して、不均一に進む腐食形態について、実例を挙げつつ解説する。
思い出の教科書,この一冊!	改訂 金属物理学序論 幸田成康(著) 井田駿太郎194
はばたく	コロナ禍で過ごした博士課程 辻 流輝195
本会記事	会告
	掲示板
	研究集会
	支部行事
まてりあ・会詞 https://jimm.j _j	志・欧文誌の投稿規定・投稿の手引・執筆要領,入会申込書,刊行案内はホームページをご参照下さい. p

 $\overline{ eta$ 月の表紙写真 高分解能高角度散乱環状暗視野 $\overline{ (HR-HAADF)}$ で観測された $M_{23}C_6$ の照射誘起化学的無秩序化の様子. (叶野 翔 楊 会龍 阿部弘亨著 162頁 図6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、本誌掲載著作物の復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復写をご希望の方は、(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復写については、当該企業等法人が社団法人日本復写権センター((一社)学術著作権協会が社内利用目的復写に関する権利を再委託している団体)と包括復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。(社外頒布目的の復写については、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/復写以外の許諾(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.

Materia Japan

Volume 62 Number 3 March 2023

CONTENTS

Daisuke Ikeda 151

Ryuki Tsuji 195

Special Issue on "Recent Advances of Nuclear Materials Research" Tomokazu Yamamoto 153 Defect Analysis of Matrix Damage in Reactor Pressure Vessel Steel Using WB-STEM Kenta Yoshida, Takeshi Toyama, Koji Inoue, Yasuyoshi Nagai and Masaki Shimodaira 154 Phase Stability under Irradiation of Secondary Phase Particles in the Nuclear Material Sho Kano, Huilong Yang and Hiroaki Abe Study on Reduced Activation High Entropy Alloys for Nuclear Application Hiroshi Oka and Naoyuki Hashimoto 164 Synchrotron X-ray Study for Defect Structure in MgAl₂O₄ Spine1 Induced by Swift Heavy Ions Satoru Yoshioka and Kazuhiro Yasuda 169 Machine Learning Molecular Dynamics Simulations for Evaluation of High-Temperature Properties of Nuclear Fuel Materials Keita Kobayashi, Hiroki Nakamura, Mitsuhiro Itakura, Masahiko Machida and Masahiko Okumura 175 Regular Articles **Emerging Young Researchers** Development of a Novel Liquid Metal Solution Model Based on the Excess Thermodynamic Functions Manabu Watanabe 182 **Lecture Notes** Corrosion and Protection of Metals III ~Localization of Corrosion~ Tadashi Shinohara 187 My Memorial Textbook Kaitei Kinzokubutsurigaku-jyoron (Shigeyasu Kouda) Shuntaro Ida 194

Published by THE JAPAN INSTITUTE OF METALS AND MATERIALS

1–14–32, Ichibancho, Aoba–ku, Sendai 980–8544, Japan https://www.jim.or.jp/journal/m/ (in Japanese)

©2023 The Japan Institute of Metals and Materials

Notice for Making a Copy of This Publication

Portrait of Young Researchers The Doctoral Course Spent during the COVID-19 Crisis

Sketch of Metals No. 27 Silver

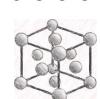
Please obtain permission from the Japan Academic Association for Copyright Clearance (JAACC) to which the copyright holder has consigned the management of the copyright regarding reprographic reproduction.

Japan Academic Association for Copyright Clearance (JAACC)
Address 9–6–41 Akasaka, Minato–ku, Tokyo 107–0052 Japan
Website https://www.jaacc.org E-mail info@jaacc.jp FAX +81–33475–5619

Users in countries and regions of which Reproduction Rights Organizations (RROs) are listed on the above website are requested to contact the respective RPOs directly to obtain permission.

For obtained permission to quote, reproduce; translate, etc., please contact the Japan Institute of Metals and Materials directly.

The front-cover, designed by Beacon Communications k.k. Graphic Studio



シリーズ「金属素猫」

No. 27 銀(Silver)

㈱特殊金属エクセル 池 田 大 亮





表面:梅と蘭の高彫仕上げ



裏面: 竹と菊の片切毛彫仕上げ

元素名:Silver,原子番号:47,原子量:107.9,電子配置: $[Kr]4d^{10}5s^{1}$,密度:10.50 Mg·m $^{-3}$ (298 K),結晶構造:面心立方(\sim 1234 K),融点:1234 K,沸点:2423 K $^{(1)}$,地設存在量:56 ng·g $^{-1}(^{2)}$ 【写真】(a)水槽内で霧氷状に成長した銀の電析結晶(写真提供:JX 金属株式会社),(b)和色の枇杷茶(びわちゃ)に近い渋い色調の四分一 $^{(3)}$ (銀銅合金)で造られた重要刀装具指定の小柄(写真提供:公益財団法人日本美術刀剣保存協会).

銀及び銀合金は、四分一⁽³⁾を始め古くから刀装具や工芸品に多く使用されてきた。また慣用句の「いぶし銀」が意味するところからも、日本人の感性に非常にマッチした金属である。

銀は金や白金と同様に地殻存在量が少なく、また水和や酸化が生じ難いことから、一般的に貴金属に分類される。一方、硫黄やハロゲン元素に対する反応性は高い。その他の物性では、全金属中で最も高い電気伝導率と熱伝導率を持ち、380~780 nm の可視光領域における反射率は最も高く、また展延性にも非常に優れている。これらの特性から銀の用途は工業用が約55%と最も多く、次いで投資用と宝飾品用がそれぞれ約20%で、銀器用が約5%になっている。工業用では、従来ハロゲン化銀の特性を活かした写真の感光材が大きなウエイトを占めていたが、カメラのデジタル化への移行に伴って近年ではフィルム用途は激減し、代わって太陽光パネル用途の増加傾向が見られる。また高反射率の特性を利用して、鏡や反射フィルムにも多用されている。

工業用の需要の内,現在最も多いものは電気・電子機器向けで,特に接点材には年間約6000tの銀が使用されている.

接点材として最も一般的なものは、純銀である.しかし使用環境下に硫黄が存在すると接点表面に硫化被膜が生じて接触面の抵抗が増加し、接点不良を起こすといった欠点がある.そのため被膜を破壊出来る十分な接触圧を確保する必要があるが、純銀接点は低硬度であるため摩耗量の増加が懸念として残る.この様な場合は銀接点の表面に金フラッシュめっきを施して、銀接点表面の硫化を防ぐ対応が取られている.

中電流域から高電流域における各種リレーの開閉器には、従来、耐溶着性や耐消耗性に優れた Ag-Cd 系の合金が使用されて来た。しかし RoHS 指令等でカドミウムが使用禁止物質に指定されて以来、カドミフリー接点への移行が進んだ。その代表的なものに Ag-Ni 合金がある。 Ag-Ni 合金は

多くの銀合金が溶製材であるのに対し、Ag と Ni は固溶体を形成しない合金系であることから粉末燃結法で製造される. Ag-Ni 合金は、銀の素地中にニッケル微粒子が均一分散した組織で耐溶着性に優れ、且つ接触抵抗が極めて安定した接点材である.

CDやHDドライブに使用するモーターのコミュテータといった摺動接触面には、高伝導率を保持しつつ耐摩耗性を向上させたAg-Cu系の合金が採用されている。他方相手方のブラシには、Ag-Pd-Cu系の合金が用いられる。Ag-Pd-Cuは析出硬化型の合金で、耐摩耗性に非常に優れている。ブラシ接点のベース材にAg-Pd-Cuの熱処理条件とほぼ同じ条件の析出硬化型Cu合金を組み合せることで、モーターブラシの要求特性に最適な接点硬度とバネ性の向上を同時に達成することが出来る。

接点材で忘れてはならない材料に、PGS 合金(1号合金)がある.PGS 合金は耐食性と耐摩耗性に優れており、また接触抵抗が低く安定で信頼性が高い. 微弱電流用のスイッチや通信機器用のリレーに採用されている. またPGS 合金を使用した接点ではクロスバー機構が多く採用されており、構造上でもより信頼性の高い接点として市場に展開されている.

近年のモーターはブラシレス化が進み、またストレージ関連では CD が USB に HD が SSD といった具合に、モーターレス化による接点需要の減少傾向が認められるが、銀の持つ優れた特性を活かして、新規工業用途の開発や展開が期待される.

な 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, S. Gao: "The Crust", Elsevier Ltd., (2004), 1–64.
- (3) 池田大亮:金属, 82(2012), 65-70.

次号! 金属なんでもランキング!

No. 21 酸化物の標準生成ギブス自由エネルギー

〈刊行物のご案内〉



●日本金属学会誌(月刊) https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jinstmet/-char/ja/

オンラインジャーナルは、全論文フリーダウンロード可能、投稿・掲載費用無料、各種データ ベース搭載 (Web of Science, CrossRef..)、レビュー・オーバービューの定期的な掲載、速報 論文等早期公開のカテゴリも充実(受付から掲載まで最短40日で公開).



● 共同刊行欧文誌:Materials Transactions(月刊) https://www.jstage.jst.go.jp/browse/matertrans/-char/ja/

材料系 14 学協会での共同刊行を実施. 公開から 6ヶ月経過した論文は、フリーダウンロード 可能 (J-STAGE). さらに、2018年2月より、公開後すぐにフリーダウンロード可能となるサー ビスを開始、各種データベース登載 (Web of Science, CrossRef...), Review Overview の定 期的な掲載. Express Rapid Publication 等早期公開のカテゴリも充実(受付から掲載まで最短 40日で公開).



● 日本金属学会会報「まてりあ」(月刊) https://www.jim.or.jp/journal/m/

会員の情報交換や啓発・教育を目的とした会報誌「まてりあ」、啓発を促す「最近の研究」・「講 義ノート」,若手の活躍を紹介する「新進気鋭」「はばたく」「スポットライト」記事,大学・企 業の現場を紹介する「研究室紹介」などバラエティに富んだ内容を毎月お届けしております. そ の他、「金属素描」「金属なんでもランキング!」など『金属』に視点を当てた記事も掲載してお ります、オンラインジャーナルでの閲覧も出来ます、是非、ご活用下さい、

〈学術図書類出版案内〉

●金属化学入門シリーズ

●金属工学シリーズ

- ●講座・現代の金属学 材料編
- ●セミナーテキスト
- ●講座・現代の金属学 製錬編
- ●シンポジウム予稿集

●単行本

◇日本金属学会春秋講演大会 開催予定◇

★2023年3月7日(火)~10日(金) 東京(浜松町)·東大駒場 I キャンパス

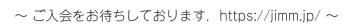
15日 (水)

高校生・高専学生ポスターセッション (オンライン)

★2023年9月19日(火)~22日(金) 富山大学五福キャンパス

〈多彩な学会活動〉

- ●講演大会(年2回)·調査研究活動
- ●セミナー/シンポジウム・研究会・若手研究グループ活動
- ●オンライン教育講座
- ●支部活動(全国7支部)
- ●表彰事業(論文賞/金属組織写真賞etc··)
- World Materials Day Award 事業
- 男女共同参画活動





熱気溢れるポスター発表



原子力材料研究の最前線

企画にあたって

山 本 知 一*

2050年のカーボンニュートラルの実現に向けて、原子力 発電は二酸化炭素を排出しない発電方法として再評価されて いる. 国のグリーントランスフォーメーション(GX: Green Transformation)基本方針において、原子力発電はベースロ ード電源として位置付けられ、停止中の原子炉の再稼働と次 世代炉の開発・建設が決定された。2025年の稼働を目指し て国際熱核融合実験炉(ITER)の建設も2021年より本格的に 始まっており、核融合炉の実現に向けた研究が活発化してい る. そのような中,次世代炉や核融合炉の実現に必要不可欠 な原子力材料の研究開発も着実に進展している. 最近では, 新しい設計思想に基づく次世代炉用の原子力材料の開発が行 われる一方で、収差補正電子顕微鏡を用いた新しい照射欠陥 の解析手法の開発や計算機シミュレーションにおける機械学 習の応用など新たな潮流が生まれている. そこで第9分野 (エネルギー関連材料)では、原子力材料の最新研究を紹介す る本特集を企画した.特に原子力材料においては、放射線照 射に伴う照射欠陥の挙動が材料の特性および寿命を決めるこ とから、照射欠陥の研究を中心に特集を構成した.

東北大学の吉田健太先生,外山健先生,井上耕治先生,永 井康介先生, JAEA の下平昌樹博士には,「ウィーク・ビー ム走査透過電子顕微鏡法を用いた原子炉圧力容器鋼のマトリ ックス損傷評価」と題して、微小な照射欠陥集合体の歪み場 を可視化する新しい手法であるウィーク・ビーム走査透過電 子顕微鏡法について解説していただき、その原子炉圧力容器 鋼の監視試験片への応用について紹介いただいた. 原子炉圧 力容器の照射脆化は,原子炉の寿命を決める因子の1つで あり、その正確な評価およびメカニズムの解明が原子炉の健 全性を正しく評価する上で重要である. 東京大学の叶野翔先 生,阿部弘亨先生,上海交通大学の楊会龍先生には,「原子 力材料中における第二相粒子の照射下相安定性」と題して, 核融合炉構造材料である低放射化フェライトマルテンサイト 鋼(F82H)中の炭化物のような第二相粒子の照射下での相安 定性に関する研究について紹介していただいた. 鋼中の第二 相粒子は、構造材料の強度を支配する重要な因子の1つで あり、放射線環境で使用される際にはその照射挙動が重要と なる. 北海道大学の岡 弘先生,橋本直幸先生には,「原子 炉用低放射化ハイエントロピー合金の開発研究」と題して, 原子力用構造材料としてのハイエントロピー合金の開発およ

びその照射損傷の特徴について解説していただいた. ハイエ ントロピー合金は、その優れた機械的特性や点欠陥の拡散が 遅く、優れた耐照射損傷性を持つことが期待されることか ら、原子力分野においても注目されており、基礎研究が活発 に行われている. 九州大学の吉岡聰先生, 安田和弘先生に は、「高速重イオン照射誘起によるスピネル構造酸化物中欠 **陥のシンクロトロン X 線解析**」と題して、放射光施設での 小角 X 線散乱(SAXS)および X 線吸収分光法(XAFS)を駆 使した核燃料中における核分裂片を模擬した高エネルギー重 イオン照射により形成される照射欠陥の解析について紹介し ていただいた. 第一原理計算と組み合わせたスピネル中の照 射欠陥の解析が行われている. 日本原子力研究開発機構の小 林恵太博士,中村博樹博士,板倉充洋博士,町田昌彦博士, 奥村雅彦博士には「機械学習分子動力学法による核燃料物質 の高温物性評価」と題して、第一原理計算分子動力学のデー タからニューラルネットワークを用いた機械学習により、高 精度なポテンシャルを作成し、分子動力学計算を行う機械学 習分子動力学法について解説していただき、核燃料物質であ る二酸化トリウムの高温物性評価への応用例を紹介いただい た. 機械学習分子動力学法による熱物性評価は, 核燃料物質 のように実験が困難な系に対して非常に有効な手段であるこ とが示される.

本特集では、最先端の計測技法を用いた照射欠陥の解析から第一原理計算と機械学習を組み合わせたシミュレーションまで原子力材料分野の最近の研究成果について解説記事を執筆いただいた。今回紹介できたものは原子力材料研究のごく一部となるが、本特集が本会会員の皆様方を始め多くの方々に興味を持っていただく契機となれば幸甚である。最後に、本特集を企画するにあたり、執筆を快諾いただいた著者の先生方に御礼申し上げます。



山本知一

2012年4月 九州大学 大学院工学研究院 学術研究員 2020年1月 九州大学 超顕微解析研究センター 助教 2022年6月 九州大学 現職

専門分野:電子顕微鏡,原子力材料,ナノ材料,触媒 材料

◎電子顕微鏡を用いエネルギー材料の構造解析を中心に研究活動を行なっている.

^{*} 九州大学 大学院工学研究院; 助教(〒819-0395 福岡市西区元岡744)
Preface to Special Issue on "Recent Advances of Nuclear Materials Research"; Tomokazu Yamamoto (Kyushu University, Fukuoka)
Keywords: nuclear materials, nuclear fuels, radiation damage
2023年2月7日受理[doi:10.2320/materia.62.153]



原子力材料研究の最前線

ウィーク・ビーム走査透過電子顕微鏡法を用いた 原子炉圧力容器鋼のマトリックス損傷評価

1. はじめに

軽水炉原子炉圧力容器 (Reactor Pressure Vessel: RPV)は 交換不可能であり、実質的に原子炉の寿命を決める重要なコンポーネントの1つである。中性子照射による RPV 鋼の脆化主因は、溶質・不純物原子クラスター (Solute cluster: SC)、マトリックス損傷 (Matrix damage: MD) $^{(1)}$ 、不純物 P等の粒界偏析の3つに分類される $^{(2)}$.

数ナノメートルの微小な SC については,アトムプローブトモグラフィー (Atom-Probe Tomography: APT) が有効な分析評価法として用いられてきた.例えば,第一世代型RPV 鋼(1970年代前半まで)では,高密度の Cu 富裕析出物(サイズ:1-2 nm,数密度: 10^{23} /m³ 程度)が脆化因子として評価されてきた $(3)^{(4)}$. Cu が0.05%程度の第二世代型RPV鋼では,4~12倍程度の Ni,Mn,Si を主成分とした SC が脆化主因として APT によって見出された $(5)^{(6)}$. 20年以上の研究によって,硬化型脆化における SC 寄与はかなり理解が進んだといえる.

一方で、MDについては、計算機シミュレーションによって、自己格子間原子(Self-interstitial atom: SIA)クラスターが形成されることが示されたが(**)、RPV 鋼 SIA クラスターのサイズや数密度を正確に評価した報告は少ない。従来の透過電子顕微鏡では、SIA クラスターによる回折コントラストよりも、干渉性の偽像が強く写る場合も多く、数密度が過小評価された MD の寄与が SC に比べて小さいと考えられる場合もあった。

本研究では、転位運動の阻害因子となるサイズ(直径3nm

程度の転位ループなど)に成長した照射欠陥集合体のひずみ場を選択的に計測するためのウィーク・ビーム走査透過電子顕微鏡法(Weak-Beam Scanning Transmission Electron Microscopy: WB-STEM)を開発し、RPV 鋼中の極めて微小な照射欠陥の定量評価に成功した。微小な格子間原子型転位ループが重要な硬化型脆化因子であることを明らかにした(8)(9)。中性子照射によって生じる転位ループや溶質原子クラスターのサイズ分布と数密度の精密評価法は、原子炉圧力容器に生じる照射欠陥集合体と転位との相互作用も明らかにした(10)。

本稿には、WB-STEM の原理と測定方法について解説する。そして、欧州加圧水型原子炉監視試験片の分析結果を例に、従来、その脆化への寄与がよく理解されていなかったMDの照射損傷に関する知見を示す。供試材は溶接材であり、化学組成は0.022% C-Fe(しこみ量:0.02C, 0.01S, 0.01P, 0.23Si, 1.30Mn, 0.73Ni, 0.11Cr, 0.04Cu, 0.50Mn, 0.01V, 0.02Al, 0.01N)である。未照射材および、照射量の異なる全4回分の監視試験片を調べた。以下、未照射材 U、第1回監視試験片 $11:1.3\times10^{23}$ n/m²,第2回監視試験片 $12:(3.4\times10^{23}$ n/m²),第3回監視試験片 $13:(8.2\times10^{23}$ n/m²),第4回監視試験片 $14:(1.2\times10^{24}$ n/m²)と記述する.

2. WB-STEM によるマトリックス損傷の評価

図1に示されるWB-STEM法は、材料内部に存在する特定の格子欠陥に最適な電子線の収束角および検出角を自由に設定することを特徴とする。本実験試料では、マイクロサンプリング時の後方散乱電子回折法(EBSD: Electron Back

Defect Analysis of Matrix Damage in Reactor Pressure Vessel Steel Using WB-STEM; Kenta Yoshida*, Takeshi Toyama*, Koji Inoue*, Yasuyoshi Nagai* and Masaki Shimodaira*,**(*International Research Center for Nuclear Materials Science, Institute for Materials Research, Tohoku University, Oarai, Ibaraki. **JAEA, Oarai, Ibaraki)

Keywords: RPV; reactor pressure vessel, irradiation hardening, microstructure, WB-STEM; weak-beam scanning transmission electron microscopy

2022年12月 1 日受理[doi:10.2320/materia.62.154]

154 特 集

^{*} 東北大学金属材料研究所;1)准教授 2)教授(〒311-1313 茨城県東茨城郡大洗町成田町2145-2)

^{**} 現在; JAEA

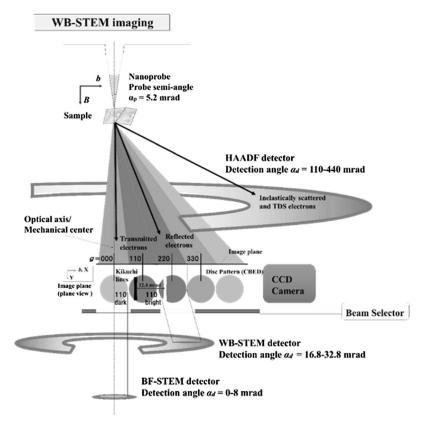


図 1 WB-STEM 光学図.

Scattered Diffraction) 像において、比較的大きな格子ひずみとそれらの不均一な分布、および、格子不整合な析出物の存在が予見されていた.また未照射材 U の球面収差補正透過電子顕微鏡を用いた予備観察によって、サブナノレベルの加工ダメージも表面近傍に存在することが確認されていた.そのため、本研究では、WB-STEM 観察の入射電子線ナノプローブの集束半角 $\alpha_{\rm p}$ を 5.2 mrad に、光軸上の明視野検出器の検出角 $\alpha_{\rm d1}$ を 0-6 mrad に、g=220回折ディスク選択のための円環検出器の検出角 $\alpha_{\rm d2}$ を 16.8-32.8 mrad に、熱散漫散乱電子検出のための円環検出器の検出角 $\alpha_{\rm d3}$ を 110-440 mrad 程度にそれぞれ設定した.

図2には、WB-STEM 法において STEM 検出器および ビーム選択装置および CCD カメラを挿入する像面で撮影し た回折ディスクパターンを示す. 鉄体心立方格子の[001]入 射の場合,直径30 μm の収束レンズ絞り(Condenser lens aperture: CLA)を用いる場合, g₂₂₀ など 2 次の回折ディスク までが透過ディスク gooo と干渉したディスクパターンが形 成される. 2gディスクは 0.0987 1/nm の周波数成分に対応 するので、図2(a)の収束電子を走査することで、1Å 分解 能の原子カラム像が撮影される. 干渉効果を低減し, 照射欠 陥集合体の有するひずみ場によって散乱された電子を選択的 にイメージングする WB-STEM 法では、図 2(b) および図 (c)のようなディスクパターンを形成し、重なりの無くなる 2次、3次の回折ディスク内のある領域をビーム選択装置で 切り取って WB-STEM 検出器によって撮像する. 図 2(b)のような収束角 10 mrad 程度の WB-STEM 条件は, 圧延試 料やラス境界を含むマルテンサイト鋼に有効で、図2(c)の ような収束角 5 mrad 程度の WB-STEM 条件は、タングス テン試料中のナノボイド観察など、電子の平均自由行程の短

い原子番号の大きい試料の低倍率・大画角観察に有用である⁽¹¹⁾.

図3には、欧州加圧水型原子炉溶接材監視試験片のWB-STEM 像を示す、未照射材を含む全ての試料に対して、回 折条件: g=110, (g, 3g), 2g を用いた. それぞれの WB-STEM 像中には転位ループの歪み場が輝点として結像され ている. 100×100 nm² の標準面積当たりに pixel 強度閾値 100以上の転位ループと判定される輝点は、各試料でU:36 個, I1:39個, I2:41個, I3:202個, I4:1207個見つか り、密度は、 $U:1.7\times 10^{21}/m^3$ 、 $I1: 1.5\times 10^{21}/m^3$ 、 $I2: 2.2\times$ $10^{21}/\text{m}^3$, I3: $1.2 \times 10^{22}/\text{m}^3$, I4: $3.4 \times 10^{22}/\text{m}^3$ (膜厚範囲 $150 \pm$ 50 nm での計算値) であった. 図 3(a) の未照射 U 材の WB-STEM 像中の分割領域 (100×100 nm²) に 1 個もしくは 2 個 描画される緑色の輝点は、中性子照射由来ではなく溶接材監 視試験片に含まれる欠陥や酸化物、およびイオン研磨など試 料加工ダメージに起因するものであると考えられる. I1, I2 材中の輝点密度は、誤差の範囲で U 材と同程度であった. I3, I4 材中の輝点密度増加は有意であり、中性子照射欠陥集 合体(転位ループ)に起因すると考えられる.

転位ループの判定には、 $g \cdot b$ 転位解析を用いた $^{(12)}$. 図 4には、輝点密度が増加し始めた I3 材で実施した WB-STEMによる $g \cdot b$ 転位解析を示す。表面の酸化物ダメージ層の影響を軽減するため照射後焼鈍後の I3 材 (400°) から [001] 入射で現れる g=1-10, -1-10, 0-20, -200系列の回折ディスクから、WB-STEM 検出器を用いて暗視野 WB-STEM 像(励起誤差(g,4g)2g ディスク選択)を撮影した。格子不整合な析出物を確認するため、明視野像と熱散漫散乱電子像も同一視野で測定し、比較した。図中の起点はそれぞれ、バーガースベクトルが 1/2[1-11] もしくは 1/2[-111] (黄丸)、

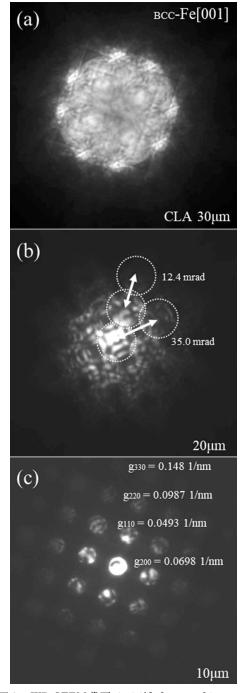


図 2 WB-STEM 像面での回折ディスクパターン. (a) CLA30 μm, (b) CLA20 μm, (c) CLA10 μm

1/2[111]もしくは 1/2[11-1](青丸), [010](緑丸)および [100](赤丸)に分類され, $1/2\langle111\rangle$ 型転位ループの割合はおよそ75%となった.25%の[100]型転位ループは,400℃までの焼鈍過程において,2 つの $1/2\langle111\rangle$ 型転位ループの合成によって形成したと考えられる $^{(13)}$. 以上の微細組織観察の結果,高照射量の監視試験片 I3, I4 の中には, $1/2\langle111\rangle$ 型転位ループが $10^{22}/m^3$ を超える数密度で形成していることが分かった.

3. 溶質原子クラスターとマトリックス損傷の照射量 依存性比較

図 5 (a) には APT による未照射材 U から I3 材の Ni 原子

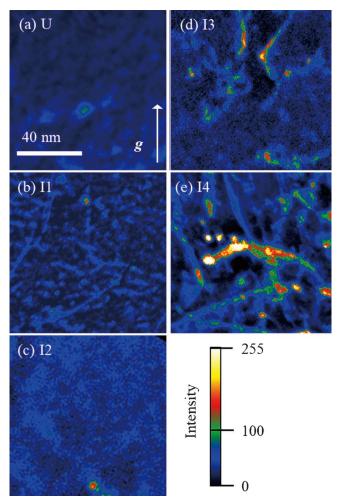
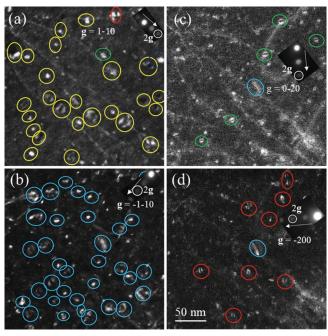


図 3 (a) (e) 監視試験片 U, I1, I2, I3, I4 材から撮影した WB-STEM 像.

の三次元マップを図 5(b) には I4 材中の Ni および Cu, Mn, Si, Cr, Mo, P, C 原子の三次元マップを示す。溶質原子クラスター(Ni-Mn-Si クラスター:SC) は I2 材中で観察されはじめ、I3, I4 材では高密度に形成された。高線量材中の SC は大きく鮮明に濃化した。SC には、Cu および P も僅かながら含まれることが示された。SC が確認された I2, I3, I4 材中の数密度は、それぞれ、 $4.3\times10^{22}/m^3$ 、 $2.7\times10^{23}/m^3$ 、 $2.3\times10^{23}/m^3$ であり、I3 材と I4 材でや増加傾向が飽和した。WB-STEM で計測した転位ループの数密度を比較すると、I3 材では転位ループの20倍以上、I4 材で約7倍の高密度なSC が形成されていた。

本研究グループの下平は、これらの転位ループおよび SCの硬化量を Orowan モデルおよび Russell-Brown モデル $^{(14)}$ を用いて見積もり、高照射線量域での転位ループの高い寄与を提唱した $^{(9)}$. 実測した直径 4-5 nm 程度転位ループについて、本研究で想定した転位運動に対する障害物強度 α は 0.1 であり、これは分子動力学シミュレーション $^{(15)}$ や機械試験 $^{(16)}$ を用いた先行研究の文献値(0.1から 0.8の値)からも、最も慎ましい転位ループ硬化量の算出であるといえる。しかしながら、結果として、図 6 にまとめるように、転位ループによる硬化量 ΔHv_{Loop} は高照射量領域 $(I3: 8.2 \times 10^{23} \, n/m^2, 0.14 \, dpa 相当、<math>I4: 1.2 \times 10^{24} \, n/m^2, 0.18 \, dpa 相当)$ では、溶質原子クラスターによる硬化量 ΔHv_{SC} と同等程度であり、



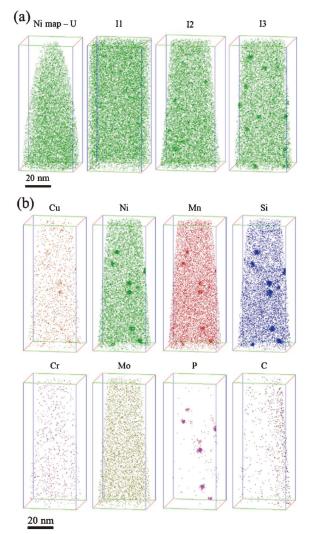


図 5 (a) 監視試験片 U, I1, I2, I3 の APT による Ni 原子マップ, (b) I4 材の Cu, Ni, Mn, Si, Cr, Mo, P, C 原子の三次元マップ.

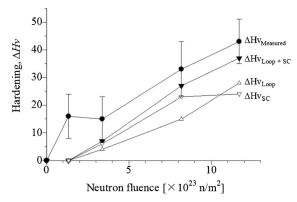


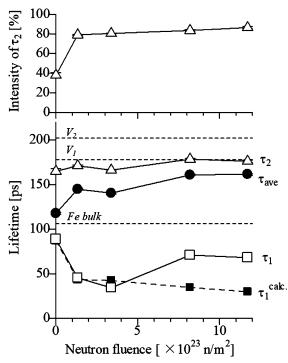
図 6 原子炉圧力容器監視試験片の照射硬化における転位ループおよび溶質原子クラスター寄与の照射量依存性.

 $\Delta H v_{Measured}$ (測定値)の半分程度の寄与を示した。我々の結果は,ビッカース硬さ測定で評価した監視試験片の照射硬化量 $\Delta H v_{Measured}$ の増加傾向が,一定の SC 化学組成を仮定する $\Delta H v_{SC}$ と等方的な障害物強度 α を仮定した $\Delta H v_{Loop}$ で評価できる可能性を示している。

4. 陽電子寿命測定による空孔型欠陥の検出

RPV 鋼中の照射組織の形成・発展を理解するためには空孔や空孔-溶質・不純物複合体の観察が不可欠だが、これはこれまでに述べた WB-STEM や APT でも容易ではない・陽電子寿命測定(Positron Annihilation Spectroscopy: PAS)はこれらを敏感に検出できることに特色がある実験手法である。また、非破壊測定であるため、貴重な監視試験片試料にも簡便に適用可能である。

監視試験片(U, I1, I2, I3, I4 材)の陽電子寿命測定結果を図 7に示す.未照射では陽電子平均寿命 (au_{ave}) は115 ps であ り、純鉄バルク中における値に近く、陽電子を捕獲する欠陥 はほとんど存在しないことが分かった. 中性子照射後は、わ ずか $1 \times 10^{23} \, \text{n/m}^2$ 程度の照射初期(I1 材)から τ_{ave} は大きく 増加した. これは、中性子照射によって導入された空孔型欠 陥に陽電子が捕獲されたことを示す. いずれの照射量でも陽 電子寿命スペクトルは2成分(長寿命成分 72 および短寿命成 $\mathcal{G}(\tau_1)$ で良くフィッティングされた。 τ_2 は陽電子捕獲サイト の open volume を良く反映し、165-175 ps であることか ら,空孔型欠陥は単空孔かそれよりもやや小さな寸法の空げ きを持った欠陥であることが分かった. したがって、単空孔 (空孔-溶質(不純物)複合体), 転位(ループ)などが陽電子捕 獲サイトとして考えられる. 陽電子寿命が 200 ps を超える ような空孔クラスターは、 $1 \times 10^{24} \, \mathrm{n/m^2}$ 以上の高照射領域 (I4材)でも観察されなかった. 図7中には、陽電子が二種 類のサイト(バルクおよび一種類の空孔型欠陥)で消滅した場 合に予想される τ_1 の値 (τ_1^{calc}) も示す (\mathbb{I} 成分トラッピングモ デル). 4×10²³ n/m² 以下の低照射量(U および I1, I2 材)で は、実測された $\tau 1$ は τ_1^{calc} とよく一致したことから、欠陥捕 獲成分はτ₂に集約されていることが分かった.一方,8× 10²³ n/m² 以上の高照射量(I3 および I4 材)では、実測され た τ_1 は τ_1^{calc} よりも長かった.これは、単空孔よりも陽電子 寿命が短い欠陥への陽電子捕獲がより多く存在し、τ1成分



中性子照射された原子炉圧力容器鋼監視試験片の陽電 子寿命測定結果.鉄中の単空孔 (V_1) および複空孔 (V_2) における陽電子寿命計算値も示す(17).

に混在している可能性を示唆する. この結果は照射初期(I1, I2 材)において、空孔-溶質原子複合体や WB-STEM でもま だ観察できないほど微細な格子間原子型転位ループ(I-ルー プ)の前駆体などが形成され、それが硬化に寄与しているこ と、より高照射線量領域では、WB-STEMで定量解析され る I-ループに陽電子が捕獲され,本稿 2.で示した MD に よる硬化メカニズムと整合することが分かった.

おわりに 5.

本研究では、転位運動を阻害する3nm程度の照射欠陥集 合体に計測対象として磁場レンズ・可動絞り・検出器を最適 化した WB-STEM と APT, PAS を効果的に組み合わせた 最先端の照射脆化研究を解説した.

WB-STEM による欧州加圧水型原子炉監視試験片の MD 評価では、従来、予想されないほど小寸法かつ高密度な転位 ループが見つかり、それらのMDがSCと同程度の脆化へ の寄与を示すことが分かった. この中性子照射欠陥組織の分 析方法は、軽水炉圧力容器鋼のみならず、次世代原子炉候補 材として注目される9Cr-2W鋼,タングステン材料にも使 用されるようになってきており、今後、より複雑な原子炉・ 核融合炉材料への応用が期待される.

文 献

- (1) G. E. Lucas, et al.: ASTM STP, 870 (1985), 900.
- (2) R. J. McElroy, et al.: ASTM STP, 1325 (1999), 296.
- (3) T. Toyama, Y. Nagai, Z. Tang, M. Hasegawa, A. Almazouzi, E. van Walle and R. Gerard: Acta Mater., 55(2007), 6852-6860.
- (4) P. D. Edmondson, M. K. Miller, K. A. Powers and R. K. Nanstad: J. Nucl. Mater., 470(2016), 147-154.
- (5) M. K. Miller, K. A. Powers, R. K. Nanstad and P. Efsing: J. Nuc. Mater., 437 (2013), 107-115.
- P. B. Wells, T. Yamamoto, B. Miller, T. Milot, J. Cole, Y. Wu and G. R. Odette: Acta Mater., 80 (2014), 205-219.
- (7) N. Soneda and T. Diaz de La Rubia: Phil. Mag. A, 81 (2001),
- (8) K. Yoshida, M. Shimodaira, T. Toyama, Y. Shimizu, K. Inoue, T. Yoshiie, K. J. Milan, R. Gerard and Y. Nagai: Microsc., 66 (2017), 120-130.
- (9) M. Shimodaira, T. Toyama, K. Yoshida, K. Inoue, N. Ebisawa, K. Tomura, T. Yoshiie, K. J. Milan, R. Gerard and Y. Nagai: Acta Mater., 155(2018), 402-409.
- (10) Y. Du, K. Yoshida, Y. Shimada, T. Toyama, K. Inoue, K Arakawa, T. Suzudo, K. J. Milan, R. Gerard, S. Ohnuki and Y. Nagai: Materialia, 12(2020), 100778.
- (11) A. Hasegawa, T. Miyazawa, D. Ito, T. Hattori, K. Yoshida and S. Nogami: Phy. Scr., **T171** (2020), 014016.
- (12) 坂 公恭:結晶電子顕微鏡学 增補新版,内田老鶴圃, (2019), 197-212.
- (13) H. Xu, R. E. Stoller, Y. N. Osetsky and D. Terentyev: Phys. Rev. Lett., 110 (2013), 265503.
- (14) K. C. Russell and L. M. Brown: Acta Metall., 20 (1972), 969-974.
- (15) J. Marian, B. D. Wirth, R. Schäublin, G. R. Odette and J. M. Perlado: J. Nucl. Mater., 323 (2003), 181-191.
- (16) F. Bergner, F. Gillemot, M. Hernández-Mayoral, M. Serrano, G. Török, A. Ulbricht and E. Altstadt: J. Nucl. Mater., 461 (2015), 37-44.
- (17) H. Ohkubo, Z. Tang, Y. Nagai, M. Hasegawa, T. Tawara and M. Kiritani: Mater. Sci. Eng. A, 350 (2003), 95-101.

********* 吉田健太

2007年3月 名古屋大学大学院工学研究科博士課程修了

2012年4月 名古屋大学高等研究院 特任助教

2015年4月 東北大学 金属材料研究所 助教

2018年4月-現職

専門分野:透過電子顕微鏡,ナノ構造の材料科学

◎中性子照射された原子力材料の硬化・腐食および照射誘起促進効果の解明





吉田健太



外山 健



井上耕治



永井康介



下平昌樹



原子力材料研究の最前線

原子力材料中における第二相粒子の 照射下相安定性

叶野 翔** 楊 会龍** 阿部弘亨**

1. はじめに

近年の原子力材料開発では, 更なる高温, 高照射量環境下 での材料健全性を意図し、酸化物分散強化鋼(ODS: Oxide Dispersion Strengthening steel) に代表される微細組織の複 雑化による材料特性の向上が試みられている. ODS では, 粉末冶金法により鉄基等の母相中に微細な酸化物粒子を分散 析出させ、照射欠陥の消滅箇所(シンクサイト)となる界面を 材料中に大量に導入することで、高照射量下における機械特 性の劣化を低減することに成功している. これ以外にも、核 融合炉構造材料である低放射化フェライトマルテンサイト鋼 (F82H)では、M₂₃C₆(M: Cr, Fe, W)や MX(M: Ta, V X: C, N)が分散析出することで、転位や粒界運動を阻害し、クリ ープ特性等の高温機械特性の向上に貢献している. このよう に,次世代原子力材料の多くは,材料中の微細粒子が材料性 能の向上に寄与し、それ故、析出物の照射下相安定性は重要 研究テーマとして, 近年, 数多くの科学論文誌で取り扱われ てきている. このような研究背景より, これまでに本研究グ ループでは、Y系酸化物、 $M_{23}C_6$ 、TaC等の種々の微細析出 物に対し、超高圧電子顕微鏡(HVEM: High Voltage Electron Microscope)ならびに、数 MeV クラスの静電イオン加 速器を用いた材料照射試験を通し、照射下相安定性に関する 調査を実施してきており、本報では、これらの研究概要、な らびに、今後の研究展望について紹介する.

2. HVEM による電子線照射⁽¹⁾⁻⁽⁵⁾

材料中に高エネルギーの電子線が照射されることで、空孔

と自己格子間原子(SIA: self-interstitial atom)の対で構成さ れるフレンケル対が導入される. また, 1個の電子線によっ て形成されるフレンケル対については、被照射材料のはじき 出し閾エネルギー, ならびに, 電子線エネルギーに依存する ものの、加速エネルギーが 1-2 MeV の場合、その形成頻度 は 1-2 個/e と見積もられる. このことから, HVEM では, 照射導入量を系統的に制御でき,尚且つ,その場観察による 動的変化を捉えることが出来るため,照射損傷組織発達等の 基礎研究に多く用いられている. これまでに本研究グループ では、F82H 鋼中に存在する TaC, ならびに、ODS 中の Y 系酸化物の照射下相安定性について HVEM を用いた電子線 照射を実施している. ここでは,集東電子ビーム照射法と称 される電子ビームを試料上で絞った状態での照射方法を採用 している.この時,電子ビームはガウシアン/ローレンツ型 の強度分布を有しているため、電子ビーム強度ないしはその 強度分布に従った損傷組織の導入、ならびに、その拡散が生 じる. よって、電子ビーム形状により微細析出物の相安定性 に対する照射損傷と拡散の効果を制御した評価が可能とな る. この結果の一例として、Fe-Ta-Cモデル合金中のTaC の照射下における微細組織変化の様子を図1(a)にまとめて 示す. ここでは、電子線の加速エネルギー、照射温度は、そ れぞれ,2 MeV,673 K である. 図中の低コントラストの物 体が TaC であり、電子線フルエンス (φt) の増加に伴って、 析出物サイズ (r_i) が収縮する様子が確認される. 集束電子ビ ーム法では, ビーム中心部が最もビームフラックスが高く, その裾野方向に向かってビームフラックスが連続的に低下す る.一方,析出物は母相中に分散析出しているため,各析出 物でフルエンス条件が異なる.よって、図1(b)に示したよ うに、各析出物の単位フルエンス当たりのサイズ変化率

Keywords: HVEM, ion irradiation, precipitates, instability, radiation induced amorphization 2022年12月13日受理[doi:10.2320/materia.62.159]

^{*} 東京大学大学院工学系研究科;1)主幹研究員 2)教授(〒319-1188 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-22)

^{**} 上海交通大学;准教授

Phase Stability under Irradiation of Secondary Phase Particles in the Nuclear Material; Sho Kano*, Huilong Yang** and Hiroaki Abe* (*Nuclear Professional School, School of Engineering, The University of Tokyo, Tokai, Ibaraki. **School of Nuclear Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, China)

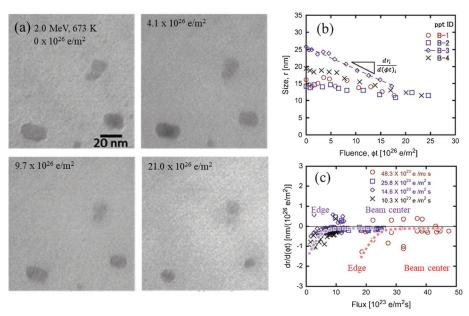


図 1 673 K において 2.0 MeV 電子線照射した Fe-Ta-C モデル合金の (a) その場観察結果と (b) 炭化物サイズの照射量依存性, (c) サイズ変化率の電子線フラックス依存性. (オンラインカラー)

$\left(\frac{dr_{i}}{d(\varphi t)_{i}}\right)$ を評価し、最終的に、このサイズ変化率の電子線

フラックス(φ) 依存性として結果を整理した.この結果を図 1(c) に示す.ここでは,ビーム中心部におけるビームフラックスが 10.3, 14.6, 25.8, 48.3×10^{23} e/m²/s の照射結果をそれぞれ緑,紫,青,赤で図示した.いずれの照射条件でも析出物の収縮速度は低フラックス側で早く,収縮挙動に対し電子線フルエンスの影響は少ないことが分かる.この結果は,電子ビームの裾野付近に存在する TaC が最も不安定化し易いことを意味している.一般に照射によって形成される空孔 濃度 (C_v) は電子線フラックスに依存し,これに起因した空孔拡散 (D_v) は $D_v \propto C_v \propto \sqrt{\varphi}$ で与えられる.したがって,ビーム中心部から裾野に向かった距離を d_e と定義すれば,

$\frac{d\varphi}{dd_{\rm e}}$ の最大箇所において $D_{\rm v}$ が最も大きくなり、本研究では、

 D_v の最大値が概ねビーム裾野付近に位置している。また,詳細な結果については割愛するが,TaCの照射下不安定化については,電子線エネルギーが $1 \, MeV$ 以下では確認されなかった。これは,TaC 中からの Ta の弾き出し閾エネルギーは, \sim 44 eV と見積もられており,HVEM よって Ta の弾き出しを生じさせるためには, $1.5 \, MeV$ 以上のエネルギーが必要と試算され,TaC の照射下相安定性に対し,TaC からの Ta のはじき出しが重要因子であることが分かる。これらより,照射下における TaC の相不安定化機構は図 2 の模式図のように与えられる。まず,①照射により析出物中では,TaC からの Ta のはじき出しが生じ,同時に,②母相中では,TaC からの Ta のはじき出しが生じ,同時に,②母相中では,TaC からの Ta のはごき出しが生じ,同時に,②日相中では,TaC からの Ta が形成する。TaC が日相中に済出した結果,析出

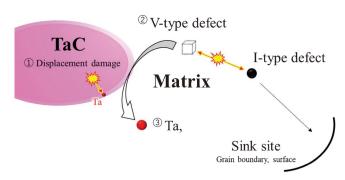


図2 電子線照射下における鉄基母相中の TaC 不安定化機構 の模式図. (オンラインカラー)

物の収縮反応が生じていると考察される.

上述の通り、照射下における Fe-Ta-C モデル合金中の TaC の不安定化は、TaC 中からの Ta のはじき出しと照射 による拡散促進効果によって定性的に説明できるように思わ れる.一方で、Fe 基母相中における Y 系酸化物について は,必ずしも,上記の物理的反応で析出物の不安定化を説明 できないことがこれまでの調査から分かっている. 図3(a) に 12Cr-ODS に対し、723 K において 120 s 照射後の明視野 像を示す. なお, 電子線の加速エネルギーは 1.0 MeV であ り,写真中央部が電子ビームの集束位置である.ここでは, 酸化物粒子が照射により成長するものと収縮するものが混在 しており、このような複雑な挙動は、ODS中に存在する2 種類の酸化物 (Y_2O_3, Y_2TiO_5) の照射耐性の違いによる結果 である⁽⁶⁾. また, 析出物の形状指数的観点からの評価結果を 図 3(b) に示す. ここでは微細析出物(d < 5 nm) とそれ以外 で区別した評価であり、Eccentricity = 0 は球形析出物を意 味する. その結果, より微細な酸化物粒子では, 照射に伴い

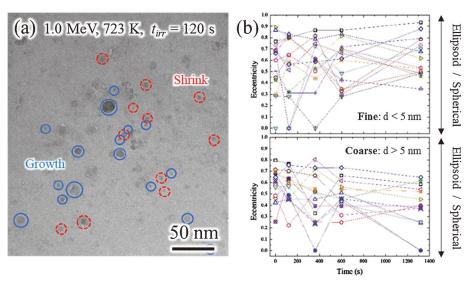


図3 723 K において 1.0 MeV 電子線照射した ODS の (a) 120 s 照射後の明視野像と (b) 酸化物形状変化の照射量影響. 明視野像において、照射によって成長、収縮した酸化物粒子を、それぞれ、青、赤で示した. (オンラインカラー)

楕円形状に変化する傾向にあったのに対し、粗大な酸化物粒 子は球形状に変化した. 現時点でこれら酸化物の界面エネル ギーは明らかでないが, 析出物の核形成, 成長の古典論に基 づく考察から, 球形析出物の界面エネルギーが最も低いた め、微細な酸化物粒子は照射下で不安定化し易いと推察され る. さらに、ODS の電子線照射下における微細な酸化物粒 子の高分解能 TEM 観察より, ODS 中の酸化物粒子内部に は未照射の時点で既に格子欠陥が存在し、ここに照射を行う ことで、酸化物粒子内部での格子欠陥の移動と、酸化物粒子 近傍の母相における転位運動が確認された. これらの実験結 果は照射下での析出物の構成元素が母相に流出していること の傍証データと考えている. すなわち, 鉄基母相へのイット リウムの固溶限は極めて低く, 熱平衡状態下では Y 系酸化 物の成長は極めて限定的である. ただし, 照射下では, 大量 の照射欠陥が母相中に形成されることで、母相中への Y の 見かけの固溶限が増加し、さらに、酸化物粒子と転位との相 互作用によるパイプ拡散機構によって,酸化物粒子から母相 に向かった Y の溶出反応によって, 照射による酸化物粒子 のオストワルド成長が生じていると考察される.

このように、HVEMでは、材料中の微細析出物の形状変化を逐次評価することで、ミクロスコピックにその不安定化の様子を伺い知ることができる。一方で、ここでの知見を実炉環境下での相安定性予測に発展させるには、損傷機構の違いに起因した変化を理解する必要がある。次項では、その研究取組として、カスケード損傷下で起こる析出物の不安定化について紹介する。

3. 加速器を用いたイオン照射⁽⁷⁾⁻⁽¹⁰⁾

数 MeV クラスのイオン加速器照射では、試料の放射化が起こらず、尚且つ、電場、磁場を操作することで、イオンビーム形状を任意に制御できる。また、実炉で数十年の年月を

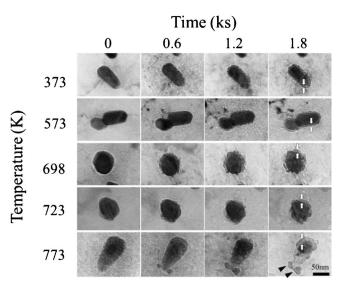
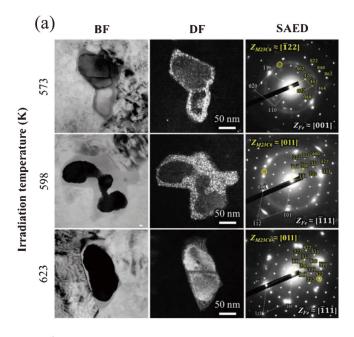


図4 373-773 K の温度範囲において 2.0 MeV 電子線照射下における F82H 鋼中の $M_{23}C_6$ の形態変化の様子.

要する照射反応(カスケード損傷)を高々、数時間の照射実験で達成できることから、原子力材料のスクリーニング等に多く用いられる照射手法である。これまでに本研究グループでは、HVEMとイオン加速器照射で生じる析出物の照射下相安定性の差異を調査した。結果の一例として、F82H鋼中の $M_{23}C_6$ を対象とした電子線照射下における相安定性の評価結果を図4に示す。照射温度は373-773 Kであり、図中の中央に見えるのが $M_{23}C_6$ である。当該析出物は照射温度に強く依存した相安定性挙動を示すのだが、573 K以上では、析出物の外周部に低コントラストの物体が形成し、これらの形成頻度は、高温照射でより顕著となることが分かる。詳細は後述するが、このような析出物の形態変化は、イオン照射では確認されず、電子線照射での特異な不安定化の描像と理解される。これ以外にも、F82H鋼中のMX(TaC に対応)のイ

オン照射下における収縮速度は \sim 0.04 nm/dpa と見積もられており、図1に示した TaC の電子線照射下における不安定化挙動とは大きく異なることが分かる。これらより、上記の実験結果は、実炉下における析出物の相安定性予測に向けて、カスケード損傷に起因した微細組織変化の理解が必要であることを示唆している。

イオン照射による F82H 鋼中の $M_{23}C_6$ の照射下相安定性の評価結果を図 5 に示す。図 5(a) の 573 -673 K 照射材の TEM 写真において,写真中央部に見える低コントラストの物体が $M_{23}C_6$ である。ここに照射を行うことで,析出物の周辺部に低コントラスト域が形成し,この暗視野(DF: Dark Field)観察から,当該領域は非晶質化した $M_{23}C_6$ であって,所謂, $M_{23}C_6$ の照射誘起非晶質化(RIA: Radiation Induced



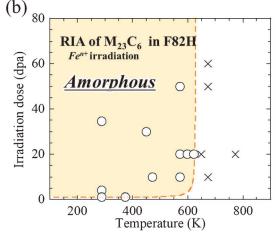


図 5 (a) イオン加速器を用いて 573-623 K の温度範囲で 20 dpa 照射した F82H 鋼中の $M_{23}C_6$ の TEM 観察結果,ならびに,(b) 照射誘起非晶質化の臨界温度/臨界照射量の評価結果.ここで, \bigcirc , \times のプロットは,それぞれ,析出物が非晶質化,結晶性を維持した照射条件であり,破線は非晶質化の臨界条件を意味する.(オンラインカラー)

Amorphization)が確認された. また, 図5(b)に示した, M₂₃C₆非晶質化の臨界条件の評価では、この臨界温度 $(T_{\rm C})$, 臨界照射量 $(D_{\rm C})$ は、それぞれ、 $\sim 625~{\rm K}, \sim 1.0~{\rm dpa}$ と見積もられ、核融合炉のブランケットの冷却配管近傍では, $M_{23}C_6$ の非晶質化が生じることが示唆された. なお, ここで 確認された非晶質析出物の様相は、電子線照射で確認された M₂₃C₆と類似するが、電子線照射された析出物の制限視野電 子線回折(SAED: Selected Area Electron Diffraction)からは 明確なハローリングは確認されず, 析出物外縁部が必ずしも 非晶質化しているとは判断されない. さらに, この不安定化 に対し、 $M_{23}C_6$ の構成元素であるWが重要な働きを担って いることがこれまでの調査から明らかになっている. 具体的 には、F82H 鋼中の M₂₃C₆ の構成元素比は、大よそ、Cr: Fe: W: C=63:14:2:21であるが、W フリーの(Fe, Cr)₂₃ C₆では,573 K で 20 dpa の照射でも析出物全体が結晶性を 維持することが分かっており、析出物中の固溶 W が RIA の 重要因子であると言える. この詳細機構を理解するため, F82H 鋼中の M₂₃C₆ の照射, 未照射材の原子分解能の高角 散乱環状暗視野(HAADF: High Angle Annular Dark Field) 観察を実施した.この結果を図6に示す.HAADF像では 原子量に依存したコントラストが得られるため、未照射材で は、重元素であるWは $M_{23}C_6$ の8cサイトに優先的に配置 されている様子が確認される.一方,ここに照射を行うこと で、32f, 48h, 4a の格子サイト(原子カラム)での輝度が増加 し、照射による W 原子の再配列、所謂、化学的無秩序化 (Chemical disordering)が可視化された. さらに, 電子エネ ルギー損失分光法(EELS: Electron Energy Loss Spectroscopy)を駆使した析出物中での原子密度評価では、照射 後も結晶性を保った部分における材料密度は照射によって低 下し、尚且つ、そのデータに大きなバラつきが生じた.これ は、炭化物の結晶内部で局所的な原子密度差が生じているこ とを意味しており, 点欠陥の存在状態を反映した結果と理解 される. ただし, 照射によって析出物の原子密度は平均で 10%程度低下していることから、析出物構成元素が系外に 流出していることが分かる.ここで、 $M_{23}C_6$ の構成元素のう ち, Cr や Fe の原子量は 52-56 u であり、照射による密度低

High resolution HAADF, M₂₃C₆

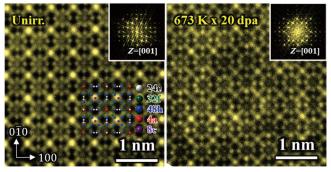


図 6 F82H 鋼中の $M_{23}C_6$ の照射/未照射材の原子分解能高角 散乱環状暗視野像. (オンラインカラー)

下を説明するためには、多量の空孔が Cr, Fe と置き換わる必要がある。一方で、重元素である W はユニットセル内に 8 個存在し、このうちの 4 個が空孔または Fe, Cr と置換すれば、当該変化を定量的に説明できる。この結果は、別の見方をすれば、W フリーの $M_{23}C_6$ では RIA が起こり難いため、析出物の結晶性が保たれた部分では、照射下で結晶性を維持するために W を排出するような組織変化が生じたとも理解される。このように、EELS を駆使した評価から、照射欠陥形成に起因した位相無秩序化 (topological disordering)も確認され、これらの化学的/位相的無秩序化によって、系のギブスエネルギー等が増加し、最終的に炭化物が非晶質化していると理解される。ただし、これらの無秩序化の様相は未だ定性的な理解に留まっており、その完全な理解に向けた定量評価が残された課題の一つである。

4. お わ り に

本報では、ODSやF82H鋼中の第二相粒子の照射下相安 定性について、HVEM やイオン加速器を利用した研究取組 について紹介した. これ以外にも、イオン照射材に対して微 小角入射 X 線回折やラマン分光法を駆使した評価から, 鉄 基材料表面に形成した酸化被膜(11), さらには,事故耐性燃 料中の金属間化合物(12)の照射下相安定性に関わる研究取組 も実施してきており、興味があれば一読頂きたい. これら一 連の研究取組を通し、照射下で起こる第二相粒子の照射下相 安定性は、高エネルギー粒子/電子によるはじき出し効果、 ならびに、照射欠陥の由来した拡散促進効果によって、ミク ロスコピックに現象変化を理解できるようになった. ただ し、ここで取り扱う物理問題は、所謂、非平衡現象であっ て、従前の統計熱力学を必ずしも利用することができない. しかし、工学的要請として、実炉下における第二相粒子の相 安定性予測は極めて重要なテーマであるが, その解明には, 非平衡組織の時間発展を紐解く必要があり、未解明の物理問 題を解き明かすチャレンジングな研究題材とも言える. その ため、析出物の照射下相安定性評価を通し、材料照射研究と 物理学との融合、ないしは、これらの双方的発展に資する研 究取組によって非平衡の統計熱力学の深化に貢献していきた いと考えている.

最後に本稿の執筆に当たり研究協力を頂いた北海道大学・ 柴山環樹先生,量子科学技術研究開発機構・安堂正巳博士, 野沢貴史博士,谷川博康博士に厚く御礼申し上げる.

文 献

- (1) H. Abe, T. Ishizaki, F. Li, S. Kano, Y. Li, Y. Satoh, T. Nagase and H. Yasuda: Mater. Trans., 55 (2014), 423–427.
- (2) H. Abe, T. Ishizaki, S. Kano, F. Li, Y. Satoh, H. Tanigawa, D. Hamaguchi, T. Nagase and H. Yasuda: J. Nucl. Mater., 455 (2014), 695–699.
- (3) F. Li, H. Abe, T. Ishizaki, Y. Li, T. Nagasaka, T. Muroga, T. Nagase and H. Yasuda: J. Nucl. Mater., 455 (2014), 724–727.
- (4) S.-R. Oh, S. Kano, H. Yang, J. McGrady, H. Yasuda and H. Abe: J. Nucl. Mater., 524 (2019), 278–285.
- (5) S.-R. Oh, S. Kano, H. Yang, J. McGrady and H. Abe: J. Nucl. Mater., 538 (2020), 15292.
- (6) J. Shen, Y. Li, F. Li, H. Yang, Z. Zhao, S. Kano, Y. Matsukawa, Y. Satoh and H. Abe: Mater. Sci. Eng. A, 673 (2016), 624-632.
- (7) S. Kano, H. Yang, J. Shen, Z. Zhao, J. McGrady, D. Hamaguchi, M. Ando, H. Tanigawa and H. Abe: J. Nucl. Mater., 502 (2018), 263–269.
- (8) S. Kano, H. Yang, J. Shen, Z. Zhao, J. McGrady, D. Hamaguchi, M. Ando, H. Tanigawa and H. Abe: Nucl. Mater. Energy, 17 (2018), 56-61.
- (9) S. Kano, H. Yang, J. McGrady, D. Hamaguchi, M. Ando, H. Tanigawa and H. Abe: J. Nucl. Mater., 533 (2020), 152088.
- (10) S. Kano, H. Yang, J. McGrady, Y. Watanabe, M. Ando, D. Hamaguchi, T. Nozawa, H. Tanigawa, K. Yoshida, T. Shibayama and H. Abe: J. Nucl. Mater., 558 (2022), 153345.
- (11) S. Kano, H. Yang, J. McGrady, M. Nakajima, M. Ando, T. Nozawa and H. Abe: J. Nucl. Mater., 563 (2022), 153639.
- (12) S. Kano, H. Yang, K. Murakami and H. Abe: Nucl. Instrum. Meth. B, 532 (2022), 1–8.

2014年 東北大学大学院工学研究科博士課程修了

主な略歴

2016年4月 東京大学大学院工学系研究科 助教

2020年4月 現職

専門分野:核融合構造材料,軽水炉燃料被覆管,イオン照射,電子顕微鏡 ◎核融合炉構造材料,軽水炉燃料被覆管の照射特性評価について X 線回折,電子顕微鏡等を駆使した分析,研究に従事している.







叶野 翔

楊 会龍

阿部弘亨



原子力材料研究の最前線

原子炉用低放射化ハイエントロピー合金の開発研究

岡 弘* 橋 本 直 幸*

1. はじめに

既存軽水炉の安全性向上や,次世代エネルギー炉の実現には,高エネルギー粒子照射環境に十分な耐性を持つ構造材料が必要不可欠である.これまでの原子力用構造材料の開発研究は,高信頼性と高安全性を有するオーステナイトステンレス鋼や低合金鋼などの鉄鋼材料を中心に行われてきたが,近年になって,特異な材料特性を有するハイエントロピー合金(High Entropy Alloy: HEA)を原子炉構造材料へ応用するための基礎研究が活発化している(1).ハイエントロピー合金は一般に5種類以上の元素をほぼ等原子量ずつ混合し,高い配置エントロピーにより単相の不規則固溶体を形成する合金を指す(2).いくつかのハイエントロピー合金は優れた高温強度(3),高い室温強度と延性(4),低温における良好な破壊靭性(5)等を示し,材料科学的に特筆すべき特性を有することが知られている(6).ハイエントロピー合金が有する特徴として,以下の4つのコア効果が提唱されている(2)(7).

- 1. ハイエントロピー効果…高い配置のエントロピーによる安定で強固な固溶体
- 2. 格子歪み効果…構成元素の原子サイズの違いによる結 晶格子歪み
- 3. 遅い拡散効果…結晶中の点欠陥トラップによる遅い拡散

4. カクテル効果…単純混合則では表現できない物性発現ハイエントロピー合金の照射損傷を考えるうえでは、これらの効果のうち格子歪み効果および遅い拡散効果が注目される. 当該効果により、ハイエントロピー合金においては点欠陥の形成および移動エネルギー、拡散障壁、拡散行程に影響を与える⁽⁸⁾と推察される. したがって、ハイエントロピー合

金の照射下安定性を理解するには、従来の材料とは異なる照射損傷機構(点欠陥の生成および相互作用、格子間原子一空孔再結合、溶質原子の拡散性(9)(10))を考慮する必要がある.ハイエントロピー合金の照射損傷に関するこれまでの研究においては、材料構成原子の拡散挙動や欠陥形成挙動における特異性および高温での照射損傷に関する報告(11)-(14)も増えつつあり、一部のハイエントロピー合金には中性子照射によるデータも存在する(15).

照射下における FCC 型構造材料中には,フランク型転位 ループや積層欠陥四面体(SFT)といった積層欠陥型の照射 欠陥が形成することで、材料の照射硬化や照射脆化を引き起 こす. これらの照射欠陥と積層欠陥エネルギー(SFE)には, 密接な関係性があると考えられる. 著者らは,組成選択性の 高いハイエントロピー合金について、構成元素混合比の最適 化による積層欠陥エネルギーの制御と、それによる照射欠陥 の形成および機械的特性の変化を抑制するための研究を行っ てきた. また,原子力用構造材料として不可欠な要素の一つ として、低放射化材料であることが挙げられる. FCC 型単 相固溶体のハイエントロピー合金として最も数多くの研究が なされている CoCrFeMnNi 等原子量合金(16) (報告者の名前 をとって Cantor 合金と呼ばれる)は、優れた機械特性を示 すことが知られており,特異な元素拡散挙動を有する可能性 も指摘されている(17). しかし、構成元素にCoを含むた め、原子力材料として用いるには放射化が問題となる. そこ で著者らは、Cantor 合金から Co を除き、FCC 単相を安定 化させるために Cr 量を減少させた低放射化 $Cr_{0.8}FeMn_xNi_y$ (添え字は原子量比)に対する研究を行っている. 本稿では, 低放射化 Cr_{0.8}FeMn_xNi_vを含む FCC 型ハイエントロピー合 金の耐照射性に関するこれまでの研究成果を紹介する(18)(19).

ハイエントロピー合金の定義は複数提案されており、その

164 特 集

^{*} 北海道大学大学院工学研究院;1)助教 2)教授(〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目)

Study on Reduced Activation High Entropy Alloys for Nuclear Application; Hiroshi Oka* and Naoyuki Hashimoto*(*Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo)

Keywords: high entropy alloy, transmission electron microscopy, irradiation hardening, frank loop, stacking fault energy 2022年11月7日受理[doi:10.2320/materia.62.164]

うち混合のエントロピーに基づく定義は、次の式で記述される理想溶体の混合のエントロピー ΔS_{mix} を用いる.

$$\Delta S_{\text{mix}} = -R \sum_{i=1}^{n} x_i \ln x_i \tag{1}$$

ここで、Rはガス定数、 x_i は成分iのモル分率、nは構成 元素の数であり、 $1.5R \leq \Delta S_{\text{mix}}$ のものは High Entropy Alloy, $1.0R \le \Delta S_{\text{mix}} \le 1.5R$ のものは Medium Entropy Alloy(MEA) と定義される. 本定義に基づけば, 低放射化 Cro.8FeMnxNiy は ΔS_{mix} が $1.35R \sim 1.38R$ 程度となり MEA に該当する. 一 方で, ハイエントロピー合金分野の研究が拡大するのに伴 い、構成元素数を増減させた合金や等原子組成比から外れた 組成の合金の研究も盛んに進められている. これらの合金の 呼称についても、High Entropy Alloys のほかに Multiple-Principal Element Alloys (20) ♦ Complex Concentrated Alloys (CCAs) (21), Concentrated Solid-solution Alloys (CSAs) (22)な ども広く用いられ, 広義でのハイエントロピー合金分野の一 つとして取り扱われることが多い. 本稿では, 広義でのハイ エントロピー合金分野に該当する研究を,幅広い読者の方々 に紹介する観点で、4種以上の金属元素を高濃度に混合した 合金をハイエントロピー合金と呼称する.

2. 積層欠陥エネルギーを制御した合金設計

ここでは、FCC 単相固溶体のハイエントロピー合金について、元素濃度比を変動させることにより積層欠陥エネルギーを制御した. 具体的には、5 元系 CoCrFeMnNi 合金および 4 元系 $Cr_{0.8}$ FeMnNi 合金の Mn 濃度および Ni 濃度を変化させた CoCrFeMn_xNi 合金 (x=0.7-1.3) および $Cr_{0.8}$ FeMn_y Ni_z 合金 (y,z=1.0-1.5)について調査した $(18)^{(19)}$.

FCC 合金の積層欠陥エネルギー(SFE)は、熱力学的観点からは以下の式で与えられる(23).

$$SFE = 2\rho_{A} (\Delta G^{FCC \to HCP} + E^{strain}) + 2\sigma$$
 (2)

式(1)において、 ρ_A は{111}面上の原子密度(mol/m²), $\Delta G^{\text{FCC} \to \text{HCP}}$ は FCC 相から HCP 相に変態したときの自由エ ネルギー差(J/mol), E^{strain} は変態時に生じる弾性ひずみエ ネルギー(J/mol), σ は FCC 相と HCP 相の界面エネルギー (J/m^2) である. これらの項のうち、積層欠陥エネルギーに 及ぼす寄与が最も大きい項は $\Delta G^{FCC\to HCP}$ である. 熱力学計 算ソフトウェア Pandat-2018を用いて、 $Cr_{0.8}$ Fe Mn_x Ni およ び Cr_{0.8}FeMnNi_x 合金の FCC 相および HCP 相の自由エネル ギー変化を計算した結果を図1に示す(19). 上側の曲線が HCP 相の自由エネルギー、下側の曲線が FCC 相の自由エネ ルギーを示しており、この2曲線の差分が式(2)の $\Delta G^{ ext{FCC} o HCP}$ に相当する. 今回調査した合金組成範囲(赤い帯 で示した組成領域)において、Mn濃度および Ni濃度が増加 するにつれて $\Delta G^{FCC o HCP}$ も増大することがわかる. これは Mn および Ni 濃度の増加が、積層欠陥エネルギーを増大さ せることを示唆している.

次に、高純度の構成純金属を目的の組成 (CoCrFeMn_xNi $_z$ (y, z=1.0-

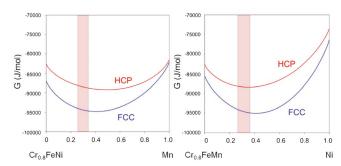


図1 $Cr_{0.8}FeMn_xNi$ および $Cr_{0.8}FeMnNi_x$ における FCC 相および HCP 相の自由エネルギー曲線 $^{(19)}$. 赤線で HCP相, 青線で FCC 相の自由エネルギー曲線を示しており, 赤い帯は今回調査した Mn および Ni の組成範囲を示す. (オンラインカラー)

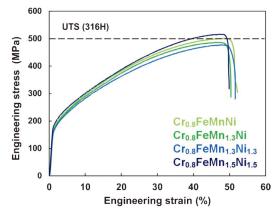


図2 室温における $Cr_{0.8}FeMn_yNi_z$ 合金の応力ひずみ曲線 $^{(19)}$. $^{(オンラインカラー)}$

1.5)) となるよう秤量し,アーク溶解にて合金インゴットを得た.インゴットに対して 1160° C×24時間の均質化熱処理を施し,90%の冷間圧延にて0.25 mm 厚の薄板とした後, 1000° C×4 時間の再結晶化熱処理を実施した.図2 は室温における $Cr_{0.8}$ Fe Mn_yNi_z 合金の応力ひずみ曲線を示す $^{(19)}$.引張強さは500 MPa 程度であり,316ステンレス鋼と同等の強度を有することがわかる.また降伏後に十分大きな加工硬化を示し,全伸びも非常に大きい.大きな引張延性は,優れた加工硬化特性により塑性不安定の達成が遅延された結果であると推察され,構造材料として有望な材料であると言える.優れた加工硬化特性は,Cantor 合金に代表される FCC単相ハイエントロピー合金においてしばしばみられるものであり $^{(24)}$,低放射化 $Cr_{0.8}$ Fe Mn_yNi_z 合金においてもその特性が確認された.

続いて、公称ひずみ ε =5%までひずみを導入し、透過型電子顕微鏡(TEM)を用いて $\langle 111 \rangle$ 方向から拡張転位の幅を精確に測定し、積層欠陥エネルギー γ (mJ/m²)を算出した、 γ の算出には以下の式を用いた。

$$\gamma = \frac{Gb_{\rm p}^2}{8\pi d} \left(\frac{2 - \nu}{1 - \nu} \right) \left(1 - \frac{2\nu \cos(2\beta)}{2 - \nu} \right) \tag{3}$$

ここで、拡張転位の幅をd、部分転位のバーガースベクトルの大きさを b_p 、完全転位のバーガースベクトルと転位線

のなす角を β 、剛性率、ポアソン比をそれぞれG、 ν としている。各試料の剛性率およびポアソン比は、バルク試料に対して超音波法を用いて測定した。図3に観察された拡張転位の弱ビーム暗視野(WBDF)像を示す。拡張転位の幅dを測定し、式(3)を用いて各試料の積層欠陥エネルギーを算出し、合金中のMn およびNi の濃度の合計で整理したものを図4に示す。Mn+Ni 濃度の増加とともに、積層欠陥エネルギーが増大することがわかる。これは上述の熱力学計算で示

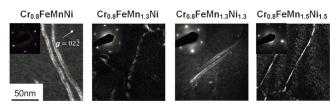


図 3 5%ひずみを与えた $Cr_{0.8}FeMn_yNi_z$ 合金中の拡張転位の弱ビーム暗視野像 ($\textbf{\textit{B}}=111, \textbf{\textit{g}}=022, \textbf{\textit{g}}/5\textbf{\textit{g}}$ で撮影) $^{(19)}$. $^{(19)}$.

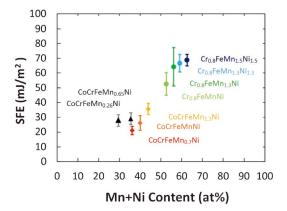


図 4 $CoCrFeMn_sNi$ 合金および $Cr_{0.8}FeMn_sNi_s$ 合金における 積層欠陥エネルギーの Mn+Ni 濃度依存性 $^{(18)}(19)$. 比較 のため, $CoCrFeMn_{0.26}Ni$ および $CoCrFeMn_{0.65}Ni$ もプロットした $^{(25)}$. (オンラインカラー)

された傾向と整合するものであり、 $CoCrFeMn_xNi$ 合金および低放射化 $Cr_{0.8}FeMn_yNi_z$ 合金において、合金を構成する元素の濃度を調整することにより、積層欠陥エネルギーをコントロールできることを示している.

3. 照射欠陥形成に対する積層欠陥エネルギーの影響

積層欠陥エネルギーが増大すると、積層欠陥を導入するために必要なエネルギーが大きくなるため、積層欠陥であるフランク型転位ループや積層欠陥四面体(FCC 結晶中の(111)面で囲まれた四面体)といった照射欠陥の形成が抑制されると期待される。一般に、FCC系の金属はBCC系の金属に比べて積層欠陥エネルギーが低く、広範な温度域で積層欠陥型の照射欠陥が形成することが知られている(26)-(28)。照射欠陥は、運動転位に対する障害物として作用し、材料の機械的特性の変化、すなわち照射硬化や照射脆化を引き起こす。転位に対する障害物の大きさや数密度から、材料強度の変化量を見積もる関係式として、オロワン強化機構が挙げられる(29)。

$$\Delta \sigma_{v} = M \alpha \mu b \sqrt{Nd} \tag{4}$$

ここで、 $\Delta\sigma_y$ は降伏応力の増加分、M はテイラー因子、 α は障害物の強度因子、 μ は剛性率、b はバーガースベクトルの大きさ、N は障害物の数密度、d は障害物のサイズである。式(4)から明らかなように、照射硬化量は障害物の数密度 N と障害物のサイズ d の平方根に比例する。著者らは、電子線照射またはイオン照射を用い、ハイエントロピー合金中に積層欠陥型の照射欠陥であるフランクループを導入し、N および d を評価した。

図 5 に超高圧電子顕微鏡を用いて400℃で0.2 dpa まで電子線照射した $Cr_{0.8}FeMn_yNi_z$ 合金の損傷組織を示す。弾き出し断面積は 4.0×10^{-23} cm 2 とした。いずれの像も,観察している結晶粒を $\langle 110\rangle$ 方向からみた像である。図5 の中段に示す暗視野像は,電子回折像上にあらわれた $\langle 111\rangle$ 方向に垂

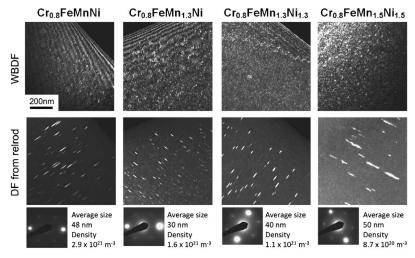


図 5 $Cr_{0.8}FeMn_yNi_z$ 合金の電子線照射による損傷組織 (19). 上段: WBDF 像,中段: (111)面上のフランクループを結像させた暗視野像,下段: 電子線回折像.

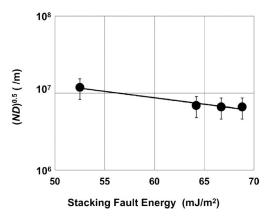


図 6 フランク型転位ループの数密度Nと平均サイズdの積N*dと積層欠陥エネルギーの関係 $^{(19)}$.

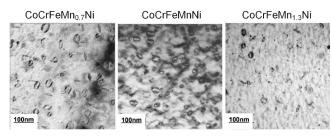
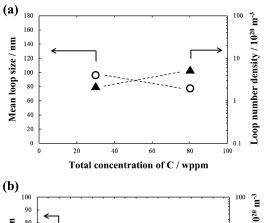


図 7 500°Cで Kr²+ イオンを照射した CoCrFeMn_xNi 合金 (x = 0.7, 1, 1.3)の損傷組織の明視野像 (**B**=110, **g**=200で 撮影) ⁽¹⁸⁾.

直なレルロッドを用いて結像したものであり、(111)面上に 形成したフランクループが白い線状のコントラストとして観 察される⁽³⁰⁾. 図5より,電子線照射により形成したフラン クループのサイズや数密度は、試料ごとに異なることがわか る. 各試料におけるフランクループのサイズd, 数密度Nを測定し、それらの積N*dを求め、積層欠陥エネルギーで 整理すると図6のようになる.図6から明らかなように、 積層欠陥エネルギーの増加に伴い N*d の平方根は減少する ことがわかる.次に、五元系のCoCrFeMn_xNi合金に対し Kr²⁺ イオンを500℃, 1 dpa まで照射し, 得られた転位ルー プ組織を図7に示す(18). 転位ループ内側におけるフリンジ の有無から, いずれの合金にもフランクループおよび完全転 位ループが形成し、解析の結果フランクループの大きさは CoCrFeMn_{1.3}Ni < CoCrFeMnNi < CoCrFeMn_{0.7}Ni となっ た(18). 各合金の積層欠陥エネルギーの大小を鑑みると(図4 参照),積層欠陥エネルギーの増加とともにフランクループ のサイズが減少したことがわかる.

以上の結果から、ハイエントロピー合金では積層欠陥エネルギーを制御可能であり、結果として積層欠陥型の照射欠陥であるフランクループのサイズの減少や、照射硬化に直接的に寄与する N^*d 値の低下が示された。ただし、積層欠陥エネルギーの増大が積層欠陥型の照射欠陥の形成・成長を抑制するメカニズムは、いまだ議論の途上である。定性的には、積層欠陥エネルギーの増加は、積層欠陥を導入するために必要なエネルギーが増大することを意味し、積層欠陥の総表面



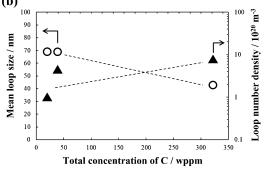


図 8 (a) Cantor 合金および (b) Cr_{0.8}FeMnNi 合金に形成し たフランクループのサイズおよび密度の炭素濃度依存性.

積を減少させるものと推察されるが、欠陥の形成または成長のどちらにより大きく影響するのかについては、今後の実験的データの蓄積と、計算科学的考察⁽³¹⁾の進展が待たれることころである.

4. HEA 中の不純物原子が損傷組織発達に及ぼす影響

照射損傷による損傷組織の発達において,不純物の影響は よく知られている. 例えばオーステナイト鋼中のマトリクス に固溶する格子間原子型の炭素や窒素は、その混入量が数十 ppm から数百 ppm の範囲であっても、転位ループの成長速 度,飽和数密度に影響することが知られ,これは点欠陥が不 純物原子にトラップされるためであると説明され $\delta^{(32)-(34)}$. また、核変換により生成するヘリウムや水素な どのガス元素は、原子空孔に容易に捕獲され、空孔型集合体 の形成・成長挙動に大きな影響を及ぼす $^{(35)(36)}$. しかし、ハ イエントロピー合金中の不純物の影響は、損傷組織の発達に 対する影響はもとより、機械的特性や相安定性の面において も, あまり議論がなされていない. そこでハイエントロピー 合金における不純物原子の影響にかかる基礎研究として, FCC型のCantor合金(CoCrFeMnNi)および低放射化 Cr_{0.8}FeMnNi 合金における炭素および窒素の効果を調べた. 炭素濃度および窒素濃度を 19~320 wtppm の範囲で変動さ せた試料をアーク溶解にて作製し、超高圧電子顕微鏡を用い て400℃で電子線照射を行った. 図8に形成されたフランク ループの大きさおよび密度を炭素濃度で整理したものを示 す. 両合金ともに、炭素量の増加に伴いフランクループのサ イズが減少し、数密度が増加していることがわかる.一方,

窒素濃度の依存性については、Cantor 合金では炭素と同様の傾向がみられたのに対し、Cr_{0.8}FeMnNi 合金ではサイズ、数密度とも明確な傾向はみられなかった。以上より、ハイエントロピー合金においても不純物原子の存在によりフランクループのような点欠陥集合体の形成・成長に大きな影響を及ぼすことが明らかとなるとともに、その影響の有無や大小は不純物原子種により異なる可能性が示唆された。このことは、ハイエントロピー合金も従来合金と同様に不純物原子濃度の制御が重要であることを示している。

5. お わ り に

低放射化ハイエントロピー合金の研究開発に関する成果として、Cantor 合金をベースにCoを除去した低放射化Cr_{0.8}FeMnNi 合金を中心に、構成元素濃度を変動させることによる積層欠陥エネルギーの制御と、照射欠陥の形成挙動について示した。当該合金の基本的な機械特性は316ステンレス鋼と同等であり、Mn またはNi の濃度を変化させることにより積層欠陥エネルギーを制御可能であること、さらに照射欠陥の詳細な解析により照射硬化の抑制が示唆される結果を得た。また、点欠陥集合体形成に対し不純物原子濃度の制御が重要であることを指摘した。ハイエントロピー合金の照射損傷過程には、大きな格子歪み、遅い拡散効果、積層欠陥エネルギーが影響するものと考えられる。これらを制御し、照射による機械的特性変化の抑制を探求するには、多様な材料組成デザインを可能とするハイエントロピー合金は重要な研究対象である。

本稿で紹介した研究は,日本学術振興会科学研究費助成事業(JP19H05161, JP20K05125, JP21H00136)の援助により行われました。ここに謝意を表します。

文 献

- (1) E. J. Pickering, A. W. Carruthers, P. J. Barron, S. C. Middleburgh, D. E. J. Armstrong and A. S. Gandy: Entropy: 23 (2021), 98.
- (2) 乾 晴行編著: "ハイエントロピー合金: カクテル効果が生み 出す多彩な新物性",内田老鶴圃,(2020).
- (3) O. N. Senkov, G. B. Wilks, J. M. Scott and D. B. Miracle: Intermetallics, 19 (2011), 698–706.
- (4) Y. F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C. T. Liu and Y. Yang: Mater. Today, 19 (2016), 349–362.
- (5) B. Gludovatz, A. Hohenwarter, D. Catoor, E. H. Chang, E. P. George and R. O. Ritchie: Science, 345 (2014), 1153–1158.
- (6) E. P. George, D. Raabe and R. O. Ritchie: Nat. Rev. Mater., 4 (2019), 515–534.
- (7) D. B. Miracle and O. N. Senkov: Acta Mater., **122**(2017), 448–511.
- (8) C. Lu, L. Niu, N. Chen, K. Jin, T. Yang, P. Xiu, Y. Zhang, F. Gao, H. Bei, S. Shi, M.-R. He, I. M. Robertson, W. J. Weber and L. Wang: Nat. Commun., 7 (2016), 13564.
- (9) Y. Zhang, G. M. Stocks, K. Jin, C. Lu, H. Bei, B. C. Sales, L. Wang, L. K. Béland, R. E. Stoller, G. D. Samolyuk, M. Caro, A. Caro and W. J. Weber: Nat. Commun., 6 (2015), 1–9.
- (10) D. S. Aidhy, C. Lu, K. Jin, H. Bei, Y. Zhang, L. Wang and W. J. Weber: Acta Mater., 99 (2015), 69–76.
- (11) Z. Cheng, J. Sun, X. Gao, Y. Wang, J. Cui, T. Wang and H.

- Chang: J. Alloys Compd., 930(2023), 166768.
- (12) T. Nagase, P. D. Rack, J. H. Noh and T. Egami: Intermetallics, **59**(2015), 32–42.
- (13) C. Parkin, M. Moorehead, M. Elbakhshwan, X. Zhang, P. Xiu, L. He, M. Bachhav, K. Sridharan and A. Couet: J. Nucl. Mater., 565 (2022), 153733.
- (14) S. Zhao, Y. Zhang and W. J. Weber: High Entropy Alloys: Irradiation, in: Encycl. Mater. Met. Alloy., Elsevier, (2022), 533–547.
- (15) C. Li, X. Hu, T. Yang, N. A. P. K. Kumar, B. D. Wirth and S. J. Zinkle: J. Nucl. Mater., 527 (2019), 151838.
- (16) B. Cantor, I. T. H. Chang, P. Knight and A. J. B. Vincent: Mater. Sci. Eng. A, 375–377 (2004), 213–218.
- (17) K.-Y. Tsai, M.-H. Tsai and J.-W. Yeh: Acta Mater., **61** (2013), 4887-4897.
- (18) N. Hashimoto, T. Fukushi, E. Wada and W.-Y. Chen: J. Nucl. Mater., 545 (2021), 152642.
- (19) N. Hashimoto, E. Wada and H. Oka: J. Nucl. Mater., 566 (2022), 153767.
- (20) O. N. Senkov, J. D. Miller, D. B. Miracle and C. Woodward: Nat. Commun., $\mathbf{6}(2015)$, 1–10.
- (21) S. Gorsse, J.-P. Couzinié and D. B. Miracle: Comptes Rendus Phys., 19 (2018), 721-736.
- (22) Y. Zhang, S. Zhao, W. J. Weber, K. Nordlund, F. Granberg and F. Djurabekova: Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., 21 (2017), 221–237.
- (23) G. B. Olson and M. Cohen: Metall. Trans. A, **7**(1976), 1897–1904.
- (24) S. Yoshida, T. Ikeuchi, T. Bhattacharjee, Y. Bai, A. Shibata and N. Tsuji: Acta Mater., 171 (2019), 201–215.
- (25) S. F. Liu, Y. Wu, H. T. Wang, J. Y. He, J. B. Liu, C. X. Chen, X. J. Liu, H. Wang and Z. P. Lu: Intermetallics, 93 (2018), 269–273.
- (26) S. J. Zinkle: Compr. Nucl. Mater., Elsevier, (2020), 91-129.
- (27) B. N. Singh and S. J. Zinkle: J. Nucl. Mater., 206 (1993), 212– 229.
- (28) G. S. Was: J. Nucl. Mater., 367-370 (2007), 11-20.
- (29) E. Orowan: Inst. Met. London, (1948), 451.
- (30) D. J. Edwards, E. P. Simonen and S. M. Bruemmer: J. Nucl. Mater., 317 (2003), 13–31.
- (31) S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, T. Kawabata and K. Suzuki: J. Mater. Sci., 54 (2019), 11096–11110.
- (32) C. Domain, C. S. Becquart and J. Foct: Phys. Rev. B, 69 (2004), 144112.
- (33) N. Hashimoto, S. Sakuraya, J. Tanimoto and S. Ohnuki: J. Nucl. Mater., 445 (2014), 224–226.
- (34) K. Nakata, Y. Katano, I. Masaoka and K. Shiraishi: J. Nucl. Mater., 122 (1984), 639–643.
- (35) N. Hashimoto, J. Tanimoto, T. Kubota, H. Kinoshita and S. Ohnuki: J. Nucl. Mater., 442 (2013), S796–S799.
- (36) Y. Hidaka, S. Ohnuki, H. Takahashi and S. Watanabe: J. Nucl. Mater., 212–215 (1994), 330–335.

2014年 北海道大学大学院工学院博士後期課程修了

2014年 4 月 日本原子力研究開発機構 研究員

2020年4月- 現職

専門分野:原子力材料,照射損傷,高温強度

◎原子炉構造材料・炉心材料の研究開発に従事.電子顕微鏡を用いた微細組 織解析.







岡 弘

橋本直幸

168 特 集



原子力材料研究の最前線

高速重イオン照射誘起によるスピネル構造酸化物中 欠陥のシンクロトロン X 線解析

吉 岡 聰** 安 田 和 弘**

1. はじめに

スピネル構造を有すマグネシウムアルミネート ($MgAl_2O_4$)は、放射線照射に対する高い耐性を示す数多くの研究報告がある $^{(1)(2)}$. 例えば、 $MgAl_2O_4$ は原子炉内で 200 dpa 以上の高照射量まで高速中性子を照射してもほとんど体積膨張を示さない。この要因の一つに挙げられるのが、カチオンの格子間原子がスピネル構造特有のカチオン空位を介して容易に再結合することであり、結果として点欠陥濃度が増加し難くなる。 図 1 に示すようにスピネル構造は、面心立方構造の

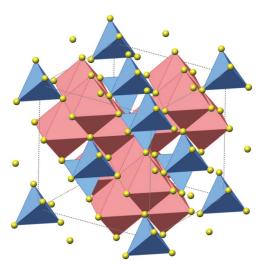


図1 正スピネル構造 AB_2O_4 の結晶構造. アニオン酸素(黄色)原子が面心立方構造を形成し、カチオン A および B が 4 面体中心 (青色) および 6 面体中心 (赤色) を占める (15). (オンラインカラー)

酸素イオン副格子と4面体および8面体のカチオンサイト から構成されている. MgAl₂O₄は, 低温域では Mgが 4 配 位の A サイト, Al が 6 配位の B サイトを占める正スピネル 構造であるが、高温域では一部のMgとAlがサイト交換を するカチオン不規則配列を生じることが知られている. この ようなカチオン不規則挙動が先述の点欠陥濃度の上昇抑制に 寄与していると考えられる.そのため、MgAl₂O₄の耐照射 損傷性をその素過程から理解するためには不規則状態の局所 構造の詳細や不規則度の定量的な評価が不可欠である. MgAl₂O₄の不規則状態に関する構造解析の報告は数多く, 中性子回折法,X線回折法や核磁気共鳴(NMR)法による実 験(3)-(10), および密度汎関数理論に基づく自由エネルギー評 価やモンテカルロシミュレーション等の理論計算があ る(11)-(14). 一方,材料の重要な構造解析手法の一つに X線 吸収分光(XAFS)法があり、この手法は原子の配位環境や電 子構造に関する情報を与える. XAFS 法は、特に元素選択 性に優れるため、スピネル構造酸化物のように複数のカチオ ンを含む系では詳細な構造観察を可能にする有効な手段であ る. XAFS の吸収端微細構造(XANES)領域では、スペクト ルから局所構造を解釈する際に、様々な標準物質のスペクト ルを参照試料として比較する手法が一般的に行われている. しかしながら, 非平衡状態にある試料や化学的に不安定な試 料のスペクトル解析では、比較検討が適切に行えるような標 準試料が見つからないことや準備出来ないことが少なからず ある. 本研究対象であるスピネル構造の不規則状態もまさに 適切な標準試料を得ることが難しい例の一つである. そこで 我々は、標準試料とのスペクトル照合のみに頼るのではな く、第一原理法による XANES の理論スペクトルを計算 し、それを用いて実験スペクトルを解釈する手法から様々な 物質の局所構造の解析に取り組んでいる $^{(15)-(17)}$.

Synchrotron X-ray Study for Defect Structure in MgAl₂O₄ Spinel Induced by Swift Heavy Ions; Satoru Yoshioka* and Kazuhiro Yasuda* (*Faculty of Engineering, Kyushu University, Fukuoka)

Keywords: *spinel, swift heavy ion, radiation effect, cationic disorder, xanes, first principles calculation, saxs* 2023年1月20日受理[doi:10.2320/materia.62.169]

^{*} 九州大学大学院工学研究院;1)助教 2)教授(〒819-0395 福岡市西区元岡744)

我々のグループでは、セラミックスに放射線の一種である高速重イオンを照射したときの局所構造変化に注目した研究を進めている $^{(15)(16)(18)-(20)}$. 高速重イオンは、その高い電子的阻止能によりターゲット材料中に高密度電子励起を誘起する。その結果、絶縁体セラミックスでは、イオン進行方向に沿って直径数ナノメートルの柱状の損傷領域が形成される $^{(21)-(23)}$. これはイオントラックと呼ばれる照射欠陥であり、これまでに透過電子顕微鏡(TEM)観察によってサイズや分布状態が報告されている $^{(18)-(20)}$. X線をプローブとしてナノメートルスケールの構造体の形状・サイズを評価する手法に小角 X線散乱 (SAXS) 法がある。SAXS 法は、散乱体とその周辺間での僅かな電子密度差から構造を捉えることが可能であり、TEM 法と比べて統計的に十分な数での散乱体の構造評価が出来ることも特長である。

本稿では、高速重イオン照射により $MgAl_2O_4$ スピネル中に形成される欠陥構造の形状・サイズおよびカチオンの不規則構造に注目し、シンクロトロン X 線を用いた SAXS 法と XANES 法による構造解析について紹介する $^{(16)}$.

2. 高速重イオン照射実験

イオン照射試料は、市販の $MgAl_2O_4$ 多結晶体(住友化学) をプレート状($10 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm}$)に切り出して用いた。高速重イオン照射は大型の加速器施設を必要とし、本実験では原子力研究機構のタンデム加速器、ビームライン H1 を利用した。イオンビームは、 $10 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ に成形され、真空中、室温において試料板面に垂直な方向から照射した。イオンエネルギーおよびイオン種は 100 MeV Xe とし、照射量変化による構造変化を観察するために、照射量を 3×10^{11} , 5×10^{11} , 1×10^{12} , 5×10^{12} , 1×10^{13} cm $^{-2}$ とする照射試料を作製した。100 MeV Xe イオンの $MgAl_2O_4$ への侵入深さは、固体物質への原子衝突シミュレーションプログラム (SRIM コード)により 10 \mum 程度と評価した。

3. シンクロトロン X 線を用いた構造観察

SAXS 実験は、九州シンクロトロン光研究センター (SAGA-LS)内の BL06 (九州大学ビームライン)を用いて入射 X線の波長を 1.5 Å、カメラ長を 2.0 m として行った.散

乱パターンは、ピクセルアレイ型 2 次元検出器(PILATUS-300K, DECTRIS)により収集した.

XAFS 測定は,高エネルギー加速器研究機構の Photon Factory 内 BL11A で行い,Mg~K-edge (1280 eV) および Al K-edge XANES (1550 eV) を蛍光法により測定した.X 線エネルギーが 2000 eV 以下の場合, $MgAl_2O_4$ 試料への X 線透過率は,厚さ $10~\mu m$ で0.001程度まで減衰する.したがって,試料から得られる XANES 信号は,全てイオン照射により損傷を受けた表面層領域から選択的に得られたものである.

4. 実験結果

図 2 に 100 MeV Xe を 1×10¹³ cm⁻² まで照射した MgAl₂ O_4 の 2 次元 SAXS 像を示す. (A) \sim (D) では、X 線ビーム に対する試料の傾斜角を変化させて観察している. (A)に示 すようなイオン照射方向に X 線ビームが平行となる条件で は、同心円状の SAXS 像が観察される. 一方、 $(B)\sim(D)$ の ようにX線ビームを傾斜させて測定した場合には、ストリ ークが発生し, さらにそれらは傾斜角が増大するに従い線幅 が細くなり、曲率が小さくなっている. このような X 線入 射方向に依存した SAXS 像の変化は、ナノサイズ散乱体の 形状が円柱状であり、かつ円柱の高さ/半径比が大きい場合 に顕著に現れる. これまでの SAXS 法によるイオン照射材 料の構造解析では、シリカ(SiO₂)ガラスやニオブ酸リチウム (LiNbO₃)において、本研究と同様なX線の入射角に依存し た特徴的な SAXS パターンが観察されている(24)-(26). これ らは、高速重イオンの飛跡に沿って生成したセラミックス中 の電子密度が変化した微細な散乱体(イオントラック)に起因 するものと考察されている. このような入射 X 線方向に依 存した SAXS 像の変化は、3×10¹¹ cm⁻² から 1×10¹³ cm⁻² まで全ての照射量において観察された.

各照射量の試料で、図 2(a) のようなイオン照射方向にシンクロトロン X 線ビームが平行となる観察条件で取得した 2 次元 SAXS パターンの強度を円環積分したプロファイルを図 3 に示す。イオン照射量の増加に従い、散乱強度も増加している。このような照射量に依存した強度変化は、イオン照射により生成するナノサイズ散乱体の数密度が増加していることを示唆している。 $5 \times 10^{12} \, \mathrm{cm}^{-2}$ および $1 \times 10^{13} \, \mathrm{cm}^{-2}$

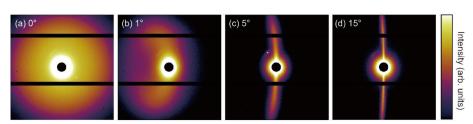


図2 $MgAl_2O_4$ に 100~MeV~Xe を $1 \times 10^{13}~cm^{-2}$ まで照射した試料の SAXS 像. (a) 入射 X 線をイオン照射方向が平行になるように試料を配置. (b-d) 入射 X 線を 1° , 5° , 15° となるように試料を傾斜して配置. 各像に見られる強度を持たない横方向に走る 2 本線と中心スポットは、検出器のモジュールギャップと入射 X 線ダイレクトビームのストッパーである (16). (オン

170 特 集

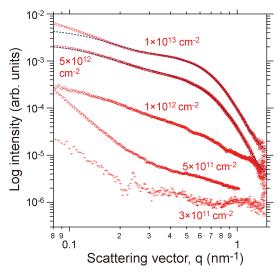


図 3 MgAl₂O₄ に 100 MeV Xe を 3×10^{11} から 1×10^{13} cm⁻² まで照射した試料の SAXS プロファイル⁽¹⁶⁾. (オンラインカラー)

の比較的高照射量まで照射した試料では,散乱ベクトルqのピークが $5\,\mathrm{nm}^{-1}$ 付近に出現し,散乱体の形状が明瞭化していることを示唆する.このようなピークを有す散乱プロファイルについて,円柱形状の散乱体を仮定して fitting 解析を行った.図3に示す fitting 曲線は実験の散乱プロファイルと良い一致を示している.fitting 解析の結果, $5\times10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ および $1\times10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$ 照射の試料に形成される散乱体は,4.9 および $5.1\,\mathrm{nm}$ の直径を持つ円柱形状であることがわかった.評価したイオントラック半径は, $200\,\mathrm{MeV}\,\mathrm{Xe}$ および $340\,\mathrm{MeV}\,\mathrm{Au}\,\mathrm{と本研究}$ のイオン照射条件と異なるものの,TEM による構造解析の報告と概ねよい一致をしている(18)(19).

図4(a)にイオン照射したMgAl₂O₄試料および非照射試料 の Mg K-edge XANES を示す. 右列(図4(b))は, 照射試 料のスペクトルから非照射試料のスペクトルを差し引いた差 分スペクトルである. 低照射量である 3×10^{11} cm⁻² および $5 \times 10^{11} \, \text{cm}^{-2}$ の試料では、XANES スペクトルは非照射試 料のスペクトルからほとんど変化していない. 一方, 高照射 量 1×10^{13} cm⁻² の試料では、非照射試料と比べてピーク A、 BおよびCの強度比が変化し、さらにそれらピークは高エ ネルギー方向にシフトしている. 差分スペクトル(b)では, (a)で示す XANES スペクトル変化が明瞭な変調として抽出 されている. さらに、そのスペクトル変調は低照射試料の差 分スペクトルにおいても現れており、変調強度が照射量に依 存して系統的に変化していることがわかる. 特に、差分スペ クトルにおいて強度が0となる等吸収点が全ての照射試料 の同一のエネルギー位置で観察されることもスペクトル変調 が系統的に現れていることを支持している.

もう一方のカチオンである Al についての Al K-edge XANES スペクトルを図 5 に示す.イオン照射量が 1×10^{12} cm⁻² および 5×10^{12} cm⁻² の試料でピーク G および H の強度比が変化している.さらに照射量が最も高い 1×10^{13}

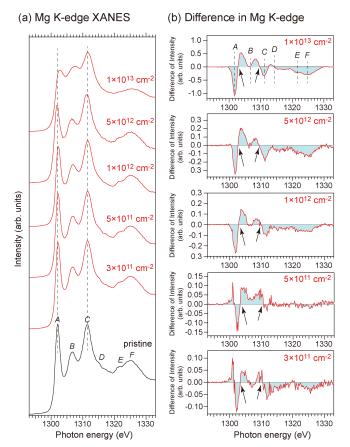


図 4 (a) $MgAl_2O_4$ に 100 MeV Xe を 1×10^{13} cm $^{-2}$ まで照射した試料および非照射試料の Mg K-edge XANES. (b) 照射試料と非照射試料の差分スペクトル $^{(16)}$. (オンラインカラー)

 cm^{-2} の試料では、ピークGとHの間に明瞭な谷が観察されている。このような変化は(b)に示す照射試料と非照射試料間での差分スペクトルでも明瞭に観察される。Mg K-edge 同様に照射量に依存した系統的な変化であり、等吸収点も同様に観察されている。

以上述べたように Mg および Al の両カチオンについて照 射量に依存した系統的な XANES スペクトル変化を得るこ とが出来た. しかし, これらの変化を引き起こす物理的根拠 を事前に測定した Mg および Al の酸化物標準試料(MgO や α - Al_2O_3)のみから理解することは非常に困難である. そこ で、2種の局所構造モデルを構築して、密度汎関数理論に基 づく XANES スペクトルを計算し、これを実験スペクトル と照合することによりイオン照射による構造変化の理解を試 みた. 構造モデルの1つは、規則状態のスピネル構造であ り, もう一方のモデルは Mg と Al がそれぞれ 6 配位と 4 配 位に配置する不規則状態である. この不規則構造は, スピネ ル構造の primitive セル (14原子)を 2×2×2 に拡張した112 原子のスーパーセル内で Mg と Al の 1 原子ずつの位置を交 換することにより導入した. その結果, 互いに交換された Mg および Alの1原子ずつが6配位サイトおよび4配位サ イトに位置し、それ以外の Mg および Al は正規のサイトで ある6配位サイト、4配位サイトそれぞれを占有したままで

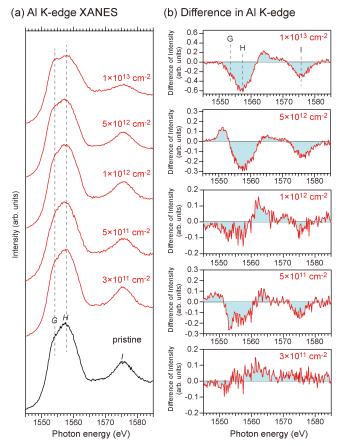


図 5 (a) MgAl₂O₄に 100 MeV Xe を 1×10¹³ cm⁻² まで照射 した試料および非照射試料の Al *K*-edge XANES. (b) 照射試料と非照射試料の差分スペクトル⁽¹⁶⁾. (オンライ ンカラー)

ある. この交換された Mg と Al はスーパーセル内で最大距 離(7.8 Å)となるように配位した. このような操作を経ても スピネル構造の基本組成 $MgAl_2O_4$ は維持されている. 不規 則状態のMg原子については、この配置を交換した6配位 Mg 原子のみのスペクトルを計算した. Al の場合も同様で あり、配置を交換した4配位Alのみのスペクトルを計算し た. XANES 理論スペクトルを得る前に、スーパーセル内の 原子位置の最適化を projector-augmented wave (PAW)法に より行っている⁽²⁷⁾⁻⁽²⁹⁾. その後に full-potential linearized augmented plane wave(FL-APW)法による Mg K-edge, Al K-edge XANES 理論スペクトルを得た $^{(30)(31)}$. 図 6(A)にス ピネル規則状態と不規則状態の Mg K-edge XANES を示 す. これらは、図中では Calc. tet および Calc. oct と示して いる. 規則状態の理論スペクトルは、非照射 $MgAl_2O_4$ の Mg K-edge スペクトルをよく再現している. 一方, 不規則 構造の6配位 Mg 原子のスペクトルは、1311 eV に鋭いピー クを示すなど規則状態とは大きく異なるスペクトル形状を示 す. 規則状態と不規則状態の計算スペクトルの違いを両者の 差分をとることで評価した結果を図6(b)に示す.この計算 から得られた不規則状態-規則状態の差分スペクトルの変調 は、実験で得られたイオン照射試料-非照射試料の差分スペ

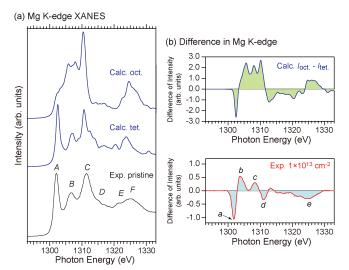


図 6 (a) 規則状態(Calc. tet.) および不規則状態(Calc. oct.) での Mg K-edge XANES 計算スペクトル. (b) 規則状態および不規則状態の計算 XANES の差分スペクトル と実験での差分スペクトルの比較. 実験でのスペクトルは, 100 MeV Xe を 1×10¹³ cm⁻² まで照射した試料と非照射試料間での差分を用いた(16). (オンラインカラー)

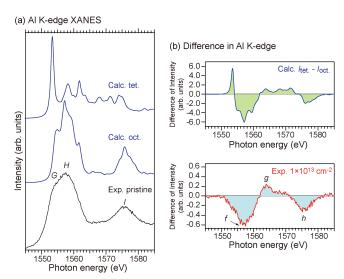


図 7 (a) 規則状態 (Calc. oct.) および不規則状態 (Calc. tet.) での $Al\ K$ -edge XANES 計算スペクトル. (b) 規則状態および不規則状態の計算 XANES の差分スペクトルと実験での差分スペクトルの比較. 実験でのスペクトルは、 $100\ MeV\ Xe\ vert 10^{13}\ cm^{-2}\ v$

クトルのピーク $a \sim e$ の変調とよく一致する。Al K-edge スペクトルでも同様の計算および実験との比較を行った結果を図7に示す。カチオン規則状態のAl のスペクトルは非照射試料 $MgAl_2O_4$ のスペクトルとよい一致をする。さらに,実験でのイオン照射試料-非照射試料間の差分スペクトルは,計算での差分スペクトルとよい一致をする。計算での差分スペクトルでは 1554 eV に鋭いピークが出現しているが,これは不規則状態 Al と規則状態 Al のスペクトルの立ち上が

172 特 集

りが僅かに低エネルギー側にシフトしていることに起因している。実験スペクトルにおいて,このピークは照射量 $1 \times 10^{13}~\rm cm^{-2}$ 試料のスペクトルでは残念ながら観察されないものの,照射量 $5 \times 10^{12}~\rm cm^{-2}$ の試料のスペクトルには観察されている(図 5)。よって計算での差分スペクトルに見られる全ての微細構造が実験スペクトルに帰属できる。このようなMg K-edge および Al K-edge の計算結果は,実験での照射量に依存した系統的なスペクトル変化がカチオンの不規則化を起源としていることを示している。

本研究では、さらに XANES を用いて高速重イオン照射の照射量に依存した不規則度を定量的に評価することを試みた、カチオン不規則状態にあるスピネル構造から得られる XANES は、4 配位サイトおよび 6 配位サイトからの信号で構成されると考えられる。すなわち不規則状態を $[Mg_{1-x}Al_x](Mg_xAl_{2-x})$ で表す。ここで、丸括弧内は 4 配位サイト,角括弧内は 6 配位サイトの組成である。スピネル構造試料において、Mg および Al の XANES 強度である $I^{Mg}(E)$ および $I^{Al}(E)$ は、不規則度 x を用いた線型結合で以下のような式で表される。

Mg:
$$I^{Mg}(E) = (1 - x)I^{Mg}_{tet}(E) + xI^{Mg}_{oct}(E)$$
 (1)

Al:
$$I^{Al}(E) = xI_{tet}^{Al}(E) + (2-x)I_{oct}^{Al}(E)$$
 (2)

ここで I_{tet} および I_{oct} は 4 配位サイトおよび 6 配位サイトからの単位モル当たりの XANES 強度である。イオン照射試料の不規則度を x = a_0 とすると両者の XANES 差分スペクトルは以下のように表される。

Mg:
$$\Delta I^{Mg}(E) = (x - a_0) \left(-I_{\text{tet}}^{Mg}(E) + I_{\text{oct}}^{Mg}(E) \right)$$
 (3)

Al:
$$\Delta I^{\text{Al}}(E) = -(x - a_0) \left(-I^{\text{Al}}_{\text{tet}}(E) + I^{\text{Al}}_{\text{oct}}(E) \right)$$
 (4)

ここで、 $-I_{\rm eff}^{\rm Mg}(E)+I_{\rm oct}^{\rm Mg}(E)$ および $-I_{\rm ect}^{\rm Al}(E)+I_{\rm oct}^{\rm Al}(E)$ は、図 6 および図 7 に示した理論スペクトルからそれぞれ見積もることが出来る。 $x-a_0$ の値は、式(3) および(4) から照射によって進行した不規則度と規定される。これらの式は、以下のように変形できる。

Mg および Al それぞれの $x-a_0(=x_p)$ については,Mg では 1293-1333 eV 間,Al では 1545-1585 eV 間の強度の平均値 を算出し用いた.本研究で用いた MgAl $_2$ O $_4$ 試料は,高温での固相焼結法により合成しているため,その段階で相当量の不規則化が発生している.そのため本研究での x_p は非照射 試料を基準とする不規則度となる.これにより通常用いられている不規則度 x と比べて, x_p は過小評価されている.図 8 には,イオン照射量に対する x_p の進行度を示す.Mg x_p edge および Al x_p の進行度を示す.Mg x_p が増加している.これまでの TEM 法による観察実験では,比較的照射量が高い範囲の x_p 5 × x_p 10½ cm $^{-2}$ および x_p 10½ cm $^{-2}$ および x_p 2 試料において,イオントラックの数密度が飽和することが報告されている.これは,先発のイオンによって形成されたイオンの飛跡が後発のイオンの照射

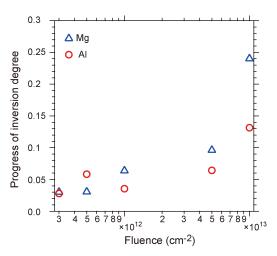


図 8 100 MeV Xe イオン照射による非照射試料からの不規則 度の進行⁽¹⁶⁾. (オンラインカラー)

によって回復していることを示唆する結果と考えられてい る. 本研究の XAFS 解析では、この照射量範囲でも不規則 度xnの明瞭な増加が見られ、不規則化が蓄積、進行してい ることが示唆された. さらに、最も照射量が高い 1×10^{13} cm⁻²では、Mg K-edge から算出される結果が Al K-edge から算出される結果に比べて大きくなっている. このことは, Mgが4配位サイトから6配位サイトに移動する傾向に比べ て、Alが6配位サイトから4配位サイトへ移動する傾向が 小さいことを示している. すなわち, カチオンの占有サイト に偏りが生じていることを示唆する結果と考えられる. この ような Mg および Al 間でサイト交換の均衡が崩れること は、欠陥構造の形成を示唆する。これまでの MgAl₂O₄ への 高速重イオン照射に関する報告では, 照射量が高い場合に, 欠陥岩塩型(Fd-3m)構造が生成することが TEM 観察によ り報告されている. スピネル構造から欠陥岩塩型構造への相 変化は、カチオンの4配位から6配位への優先的な移動に 起因する. 分子動力学シミュレーションにおいても Frenkel 型の欠陥を導入する場合に、カチオンは構造空孔を伴って再 結合し、6配位サイトを占有する傾向が報告されてい る $^{(32)(33)}$. 本研究での XAFS による構造解析見られた不均 衡なカチオンサイト交換は、この岩塩型構造への変化の前駆 的段階にあると考えられる.

5. 結 論

高い照射耐性を有する $MgAl_2O_4$ に 100 MeV Xe イオンを 照射した際の欠陥構造とカチオン不規則化過程を SAXS 法 および XANES 法によって調べた。 SAXS 法では欠陥構造 がイオン進行方向に円柱型構造を形成していることを明らかにした。イオン照射量の増加に伴って, SAXS 散乱強度も増加し,円柱構造の半径についてはこれまでの TEM 観察からの結果とよい一致をした。 Mg K-edge および Al K-edge でのスペクトル変化もイオン照射量の増加に伴って,大きく

なった. DFT 計算からの理論 XANES を用いたスペクトル解析により、実験でのスペクトル変化は、カチオンの4配位、6配位間での不規則化であることが明らかになった. XANES の実験と計算を組み合わせることで非照射試料からの不規則化の進行度を算出した. 照射量が最も高い試料では、Mg および AIが6配位サイトへ偏在し、欠陥岩塩型構造の前段階にあることが示唆された.

本研究は、松村晶 九州大学名誉教授、石川法人 日本原子力研究開発機構研究主幹、大場洋次郎 同機構研究副主幹、小林英一 九州シンクロトロン光研究センター主任研究員、奥平幸司 千葉大学准教授の協力を受けて行われました.ここに深く感謝の意を表します.

文 献

- (1) C. Kinoshita, K. Fukumoto, K. Fukuda, F. A. Garner and G. W. Hollenberg: J. Nucl. Mater., 219(1995), 143–151.
- (2) F. W. Clinard Jr., G. F. Hurley and L. W. Hobbs: J. Nucl. Mater., 108-109 (1982), 655-670.
- (3) R. C. Peterson, G. A. Lager and R. L. Hitterman: Am. Mineral., 76 (1991), 1455–1458.
- (4) S. A. T. Redfern and R. J. Harrison: Am. Mineral., 84 (1999), 299–300.
- (5) G. B. Andreozzi, F. Princivalle, H. Skogby and A. D. Giusta: Am. Mineral., 85 (2000), 1164-1171.
- (6) T. Yamanaka and Y. Takeuchi: Z. Kristallogr. Cryst. Mater., 165 (1983), 65–78.
- (7) B. J. Wood, R. J. Kirkpatrick and B. Montez: Am. Mineral., **71** (1986), 999–1006.
- (8) R. L. Millard, R. C. Peterson and B. K. Hunter: Am. Mineral., **77**(1992), 44–52.
- (9) H. Maekawa, S. Kato, K. Kawamura and T. Yokokawa: Am. Mineral., 82 (1997), 1125–1132.
- (10) D. R. Neuville, D. D. Ligny, L. Cormier, G. S. Henderson, J. Roux, A. Flank and P. Lagarde: Geochim. Cosmochim. Acta., 73 (2009), 3410–3422.
- (11) M. C. Warren, M. T. Dove and S. A. T. Redfern: J. Phys. Condens. Matter, 12(2000), L43–L48.
- (12) M. C. Warren, M. T. Dove and S. A. T. Redfern: Miner. Mag., 64 (2000), 311–317.
- (13) S. D. Rocha and P. Thibaudeau: J. Phys. Condens. Matter, **15** (2003), 7103–7115.
- (14) A. Seko, K. Yuge, F. Oba, A. Kuwabara, I. Tanaka and T. Yamamoto: Phys. Rev. B., 73 (2006), 094116.
- (15) S. Yoshioka, K. Tsuruta, T. Yamamoto, K. Yasuda, S. Matsumura, N. Ishikawa and E. Kobayashi: Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018), 4962–4969.
- (16) S. Yoshioka, K. Tsuruta, T. Yamamoto, K. Yasuda, S. Matsumura, T. Sugiyama, Y. Oba, N. Ishikawa, E. Kobayashi and K. Okudaira: J. Am. Ceram. Soc., 103 (2020), 4654–4663.
- (17) S. Yoshioka, K. Yasuda, S. Matsumura, T. Sugiyama and E. Kobayashi: J. Phys. Chem. C, 125 (2021), 5269–5277

- (18) T. Yamamoto, M. Shimada, K. Yasuda, S. Matsumura, Y. Chimi and N. Ishikawa: Nucl. Instrum. Meth. B, 245 (2006), 235–238.
- (19) K. Yasuda, T. Yamamoto, M. Shimada, S. Matsumura, Y. Chimi and N. Ishikawa: Nucl. Instrum. Meth. B, 250 (2006), 238–244.
- (20) K. Yasuda, T. Yamamoto, M. Etoh, S. Kawasoe, S. Matsumura and N. Ishikawa: Int. J. Mater. Res., 102 (2011), 1082–1088.
- (21) M. Toulemonde, W. Assmann, C. Dufour, A. Meftah, F. Studer and C. Trautmann: Mat. Fys. Medd., 52 (2006), 263–292.
- (22) C. A. Yablinskya, R. Devanathan, J. Pakarinen, J. Gan, D. Severin and C. Trautmann: J. Mater. Res., **30**(2015), 1473–1484
- (23) M. Lang, R. Devanathan, M. Toulemonde and C. Trautmann: Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., 19 (2014), 39–48.
- (24) P. Kluth, C. S. Schnohr, D. J. Sprouster, A. P. Byrne, D. J. Cookson and M. C. Ridgway: Nucl. Instr. Meth B, 266 (2008), 2994–2997.
- (25) B. Afra, M. D. Rodriguez, C. Trautmann, O. H. Pakarinen, F. Dhurabekova, K. Nordlund, T. Bierschenk, R. Giulian, M. C. Ridgway, G. Rizza, N. Kirby, M. Toulemonde and P. Kluth: J. Phys. Condens Matter, 25 (2013), 045006.
- (26) S. Park, M. Lang, C. L. Tracy, J. Zhang, F. Zhang, C. Trautmann, P. Kluth, M. D. Rodriguez and R. C. Ewing: Nucl. Instr. Meth. B, 326 (2014), 145–149.
- (27) P. E. Blöchl: Phys. Rev. B, 50(1994), 17953.
- (28) G. Kresse and J. Furthmüller: Phys. Rev. B, 54(1996), 11169.
- (29) G. Kresse and D. Joubert: Phys. Rev. B, 59(1999), 1758.
- (30) P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran F, R. Laskowski, G. K. H. Madsen and L. D. Marks: J. Chem. Phys., 152 (2020), 074101.
- (31) E. Sjöstedt, L. Nordstörm and D. J. Singh: Solid State Commun., 114(2000), 15–20.
- (32) T. Yamamoto, A. Chartier, K. Yasuda, C. Meis, K. Shiiyama and S. Matsumura: Nucl. Instrum. Meth. B, 266 (2006), 2676– 2682.
- (33) A. Chartier, T. Yamamoto, K. Yasuda, C. Meis and S. Matsumura: J. Nucl. Mat., 378 (2008), 188–192.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★ 吉岡 聰

2007年3月 京都大学大学院工学研究科博士課程修了 博士(工学)

2007年4月 現職

2019年9月 フランス CEA Saclay 研究所 客員研究員

専門分野:セラミックス構造解析、高速重イオンビーム照射

◎シンクロトロン光を用いた構造解析に従事. 特に、X線吸収分光による局所構造の解析を中心に活動.





吉岡 聰

安田和弘

174 特 集



原子力材料研究の最前線

機械学習分子動力学法による 核燃料物質の高温物性評価

小林恵太** 中村博樹** 板倉充洋** 町田昌彦** 奥村雅彦**

1. はじめに

核燃料の研究開発において,原子炉運転時からシビアアクシデント時の融点付近に至る温度領域まで,核燃料物質の詳細挙動を把握することが必須となる。しかし,その取扱いの困難さから,実験を行うことは簡単ではない。また,核燃料物質は融点が非常に高く,二酸化トリウム (ThO_2) では 3600 K以上となる。従って,融点に近い超高温下での核燃料物質の性質を詳細且つ精確に把握することは困難となる。そこで,計算機によるシミュレーションにより,核燃料物質の高温物性を評価することが,困難な実験を補完および代替する方法として大いに期待されてきた。

核燃料物質のシミュレーションとしては古典分子動力学法が広く用いられる。古典分子動力学法は原子を質点として扱い、力場と呼ばれる比較的簡単な関数で原子間相互作用を近似し、ニュートン運動方程式の積分を行うことにより、原子の挙動をシミュレーションするものである。古典分子動力学法を用いる利点は数千~万原子、数ナノ秒程度の大規模長時間分子動力学シミュレーションが可能であることが挙げられる。しかし、その精度は力場の関数形とそこに含まれる経験的パラメーターに大きく依存し、全ての実験値を精度良く再現することは一般に困難である。古典分子動力学法の他に、よく使用される方法としては第一原理分子動力学法が挙げられる。この手法は第一原理計算と呼ばれる量子力学計算手法に基づいて原子間に働く力を決定する方法であり、経験的パラメーターを用いることなく"第一原理"から高精度な物性値評価を可能にする。しかし、第一原理計算は計算コストが

原子数の3乗に比例して増加するため、扱える原子数・シミュレーション時間が強く制限される。例えば、スーパーコンピューターを用いても、数百原子・数十ピコ秒程度の計算が限界である。

上記のように、古典分子動力学法は大規模系の長時間シミュレーションが可能だが全ての物理量を正確に評価することが難しく、第一原理分子動力学法は高精度だが大規模系の長時間シミュレーションが難しい。一方で、核燃料物質の高温物性シミュレーションには大規模かつ長時間のシミュレーションが不可欠であり、さらに、原子力発電の安全性評価のためには同時に高い精度が要求される。これらの厳しい要求に応えるシミュレーション手法は長い間存在しなかった。

近年,機械学習分子動力学法(1)と呼ばれる古典分子動力学法と第一原理分子動力学法の両者の長所を持ち合わせた手法が材料科学の分野で広く使われ始めた.この手法は大量の第一原理計算結果を機械学習した相互作用ポテンシャルを用いて分子動力学法を実行するものであり,第一原理計算とほぼ同程度の精度を保ちながら大規模系での分子動力学法の実行を可能にするものである.機械学習分子動力学法を用いることにより,核燃料物質の超高温物性の高精度シミュレーションが可能になることが期待される.本原稿では先ず機械学習分子動力学法の概要と著者らが行った酸化トリウムの高温物性への適用事例(2)(3)に関して紹介する.

2. 機械学習分子動力学法の概要

原子間の相互作用は、一般に系に含まれる全ての原子の座標の関数であるが、古典分子動力学法では、少数の経験的パ

1)任期付研究員 2)研究主幹 3)室長 4)副センター長(〒277-0871 柏市若柴178-4 柏の葉キャンパス148街区 4 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 4F)

Machine Learning Molecular Dynamics Simulations for Evaluation of High-Temperature Properties of Nuclear Fuel Materials; Keita Kobayashi*, Hiroki Nakamura*, Mitsuhiro Itakura*, Masahiko Machida* and Masahiko Okumura*(*Center for Computational Science and e-Systems, Japan Atomic Energy Agency, Kashiwa)

Keywords: machine learning, molecular dynamics, first-principles calculations, nuclear fuels, high-temperature properties 2022年11月7日受理[doi:10.2320/materia.62.175]

^{*} 国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター シミュレーション技術開発室; 1)任期付研究員 2)研究主幹 3)室長 4)副センター長(〒277-0871 柏市若柴178-4 柏の葉キャンパス148街区 4

ラメーターで指定される 2 原子間距離の関数が用いられることが多い。つまり,古典分子動力学法では,座標 \mathbf{r}_i を持つ N 個の原子を含む系の相互作用ポテンシャル $V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_N)$ は 2 原子間距離 $(\mathbf{r}_{ij}=|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|)$ のみに依存する 2 体型ポテンシャル $V_{\text{pair}}(\mathbf{r}_{ij})$ を用いて $V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_N)$ ≈ $\sum_{i< j}^N V_{\text{pair}}(\mathbf{r}_{ij})$ と近似する。例えば核燃料物質の古典分子動力学法シミュレーションでは主にバッキンガムポテンシャル,

 $V_{\text{pair}}(r_{ij}) = q_i q_j / 4\pi \epsilon_0 r_{ij} + A_{\alpha,\beta_i} \exp\left(-B_{\alpha,\beta_i} r_{ij}\right) - C_{\alpha,\beta_i} / r_{ij}^6$ が使用される. 第1項はクーロンポテンシャル $(q_i: 電荷,$ ε₀:真空の誘電率),第2項はパウリの排他律に起因する原 子間斥力, 第3項はロンドン分散力による原子間引力を表 しており、 $A_{\alpha_i\beta_i}$, $B_{\alpha_i\beta_i}$, $C_{\alpha_i\beta_i}$ は原子種 α_i , β_i に依存する経験的 パラメーターである. 経験的ポテンシャルのパラメーターは 格子定数, 弾性定数等の実験データ, または第一原理計算の 結果を再現するように決められる. 核燃料物質に対する経験 的ポテンシャルの詳細はレビュー⁽⁴⁾⁻⁽⁶⁾に譲るが,これまで に核燃料物質の物性を再現するために様々な経験的ポテンシ ャルとそのパラメーターが提案されてきたことがわかる. し かし、簡単な2体型の経験的ポテンシャルでは融点等の高 温物性の再現が難しいことが報告されている⁽⁵⁾⁽⁶⁾. このよう な困難を克服するために、原子埋め込み法(embedded atom potential)と呼ばれる、多体効果を取り入れたポテンシャル が用いられるようになった. この手法は、相互作用ポテンシ ャルを次のように近似する: $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \approx V_{\text{EAM}}(\mathbf{r}_{12}, \dots, \mathbf{r}_N)$ $r_{13}, \dots, r_{(N-1)N} = \sum_{i=1}^{N} \left[F_{\alpha_i} \left(\sum_{i \neq i}^{N} \rho_{\beta_i}(r_{ij}) \right) + \sum_{i < i}^{N} V_{\text{pair}}(r_{ij}) \right], \quad \subset$ こで ρ_{α} は原子種 α に依存する電子密度, F_{α} は電子密度の関 数であるが、単純な関数が仮定され用いられることが多い. 原稿執筆時で, 最も成功した原子埋め込み法経験的ポテンシ ャルは "Cooper-Rushton-Grimes(CRG)ポテンシャル"(7)で ある. しかし、多体効果を取り入れたとしても経験的ポテン シャルでは全ての物性値を再現することは困難である. なぜ なら、本来の原子間ポテンシャル $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$ を少数の パラメーターしか持たない簡単な関数で正確に近似すること は難しいからである. 特に, 経験的ポテンシャルのほとんど は、原子座標の関数である相互作用ポテンシャルを原子間距 離の関数で近似するが $(V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \approx V_{\text{emp}}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{N})$ $r_{(N-1)N}$)), これには限界があることは明らかだろう.

最近、相互作用ポテンシャルを、人工ニューラルネットワーク等を用いた「機械学習ポテンシャル」で高精度に近似し、さらにこれまで不可能だった大規模系の高精度分子動力学法シミュレーションを可能にする「機械学習分子動力学法」が提案された。以下では人工ニューラルネットワークを用いた機械学習ポテンシャルについて概説する。

人工ニューラルネットワークを用いて相互作用ポテンシャルを構築するという試みは1995年の Blank の論文(8)まで遡る.この定式化では、原子座標等の自由度とエネルギーをそれぞれ人工ニューラルネットワークの入力と出力とし、出力が第一原理計算により得られたエネルギーと一致するように人工ニューラルネットワークのパラメーターを訓練する.この試みは一定の成功を収めたが、

- 1. 決まった原子数の系しか計算できない
- 2. 相互作用ポテンシャルが満たすべき対称性が保証されない

という二つの問題が残った.一つ目の問題は、人工ニューラ ルネットワークの入力は常に一定の次元となるため、原子座 標等を入力とする場合には,原子数が一定のものしか扱えな いことに起因する. つまり、N原子系の第一原理計算結果 を学習したニューラルネットワークポテンシャルは同じN原子系のシステムにしか適用が出来なくなる. 二つ目の問題 は、相互作用ポテンシャルが満たすべき対称性(並進、回 転,同種原子間の置換対称性)を人工ニューラルネットワー クが有していないことである. 例えば, 系に含まれる全原子 の座標を回転させた場合に相互作用ポテンシャルは変化しな いが、原子座標を入力とする人工ニューラルネットワークポ テンシャルはその保証がない. 原理的には,回転変換した座 標に同じエネルギーを対応させた教師データを用意してこれ ら全てを学習させれば座標に対する回転不変性が実現できる が、無限個の教師データが必要になるため現実的でない. こ れらの問題から人工ニューラルネットワークポテンシャルの 適用は限られたものとなっていた.

初期人工ニューラルネットワークポテンシャルのこれらの 問題点は2007年の Behler-Parrinello の方法(1)により解決さ れ、以後人工ニューラルネットワークポテンシャルは物理・ 化学・材料科学分野において広く適用されていくようにな る. 彼らは原子座標そのものではなく、原子配置の特徴量を 人工ニューラルネットワークの入力として,これらの問題を 解決した(図1). さらに、この定式化では、全系のエネルギ ーは系内の各原子に付随した「原子エネルギー」に分割可能 であることを仮定することによって, 教師データの系よりも 大きな系の分子動力学シミュレーションを可能にした. さら に、Behler-Parrinelloの方法では、この「原子エネルギー」 は近くの原子配置で決まるという仮定を置く. つまり, ある 原子iに注目した場合、座標 r_i に存在する原子iを中心とす る適当な半径 Rc を持つ球内の周辺原子の相対的な位置情報 $\mathbf{R}_i = \{\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i | \mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| \le R_{\text{C}}\}$ から、周辺原子の数によらな い一定次元の記述子 $G(\mathbf{R}_i)$ を作って人工ニューラルネットワ ークへの入力とし、出力として原子iの原子エネルギー $e(\mathbf{G}(\mathbf{R}_i))$ を得るとするのである.この操作を全原子に対し 行い, それらを合計することにより, 全エネルギーを表す人 エニューラルネットワークの出力 $E_{ANN} = \sum_{i}^{N} e(G(\mathbf{R}_{i}))$ を得 る. 人工ニューラルネットワークのパラメーターは出力 $E_{
m ANN}$ が第一原理計算エネルギー $E_{
m DFT}$ と一致するように訓 練される. さらに、彼らは記述子の成分として「対称関数 (symmetry function)」と名付けられた次の関数を提案した.

$$G_{i,\,\alpha}^{\mathrm{R}} = G_{i}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{\eta}_{\alpha},\;\boldsymbol{r}_{s,\,\alpha}) = \sum_{i\neq j}^{N} e^{-\eta_{\alpha}(r_{ij} - r_{s,\,\alpha})} f_{c}(\boldsymbol{\gamma}_{ij})$$

 $G_{i,\,\beta}^{\mathrm{A}} = G_i^{\mathrm{A}}(\xi_{\beta},\,\lambda_{\beta},\,\eta_{\beta}')$

$$S_{i,\beta} = S_{i} (\xi_{\beta}, \kappa_{\beta}, \eta_{\beta})$$

$$= 2^{1-\xi_{\beta}} \sum_{j,k\neq i}^{N} (1+\lambda_{\beta}\cos\theta_{ijk})^{\xi_{\beta}} e^{-\eta_{\beta}'(r_{ij}+r_{ik}+r_{jk})} f_{c}(r_{ij}) f_{c}(r_{ik}) f_{c}(r_{jk})$$
ここで $\cos\theta_{ijk} = \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ik}/r_{ij}r_{ik}, f_{c}(r)$ は半径 R_{C} で滑らかにゼロ

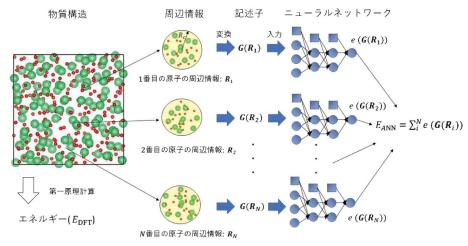


図1 Behler-Parrinello型ニューラルネットワークポテンシャルの模式図. (オンラインカラー)

となる適当なカットオフ関数である. η_{α} , $r_{s,\alpha}$, ξ_{β} , λ_{β} , η'_{β} は周辺情報 \mathbf{R}_i を記述子にエンコードする際のパラメーターで,例えば, $G^{\mathrm{R}}_{i,\alpha}$ は,原子 i から距離 $r_{s,\alpha}$ 離れた位置の幅 $\sqrt{2/\eta_{\alpha}}$ 程度の領域に何個の原子が存在するか,という情報を表している.これらの関数を用いて,記述子 $\mathbf{G}(\mathbf{R}_i) = (G^{\mathrm{R}}_{i,1} \cdots G^{\mathrm{R}}_{i,M_{\mathrm{R}}})$ を構成する.記述子の次元は $G^{\mathrm{R}}_{i,\alpha} \succeq G^{\mathrm{A}}_{i,\beta}$ のパラメーターの個数 M_{R} と M_{A} の和で決まり,周辺原子の個数にはよらない.また,これらの対称関数は明らかに並進,回転,置換対称性を明確に満たしており,その結果,原子エネルギーとその和で定義される全エネルギーもそれらの対称性を満たす事になる.

まとめると、Behler-Parrinello の方法では、物質構造 $\{r_1,\dots,r_N\}$ が与えられた時に各原子を中心とした半径 $R_{\rm C}$ 内に存在する周辺原子の相対座標 $\{R_1,\dots,R_N\}$ から配置を特徴づける記述子 $\{G(R_1),\dots,G(R_N)\}$ を構成して人工ニューラルネットワークへ入力し、出力として原子エネルギー $e(G(R_i))$ の総和として全エネルギー $E_{\rm ANN}=\sum_i^N e(G(R_i))$ を得る、という仕組みになっている。実際に $E_{\rm ANN}$ を第一原理エネルギー $E_{\rm DFT}$ にフィッティングさせる方法等、手法の詳細はレビュー論文 (9) を参照して頂きたい。Behler-Parrinello の方法は幾つかのオープンソフトウェアーに実装されており (10)(11)、ユーザーは学習アルゴリズム等、機械学習に詳しくなくても計算を実施可能である。実際に機械学習ポテンシャルを作成する際にユーザーが気にすべきことは、

- 1. 用意すべき第一原理データ(教師データ)
- 2. 対称関数のパラメーター $(\eta_{\alpha}, r_{s,\alpha}, \xi_{\beta}, \lambda_{\beta}, \eta_{\beta}')$ の決定方法
- 3. 人工ニューラルネットワークのハイパーパラメーターである. 以下では、著者らの酸化トリウムに対する高温物性研究の紹介と共に機械学習ポテンシャル作成の具体的な方法を述べる.

3. 機械学習分子動力学による酸化トリウムの高温物 性評価

(1) 機械学習ポテンシャルの作成と評価

Behler-Parrinello 型のニューラルネットワーク (Behler-Parrinello type neural network, BPNN)の訓練に使用する第一原理教師データ作成には Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) (12) (13) を用いた。また,BPNN の作成には n2p2 (11) を,分子動力学法の実行には n2p2 のプラグインを入れた Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) (14) を用いた.

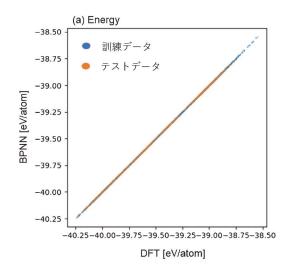
第一原理教師データには, 主に, 第一原理分子動力学計算 により得られた構造,エネルギー,原子間力を使用した.教 師データに関する重要な注意点は,学習済み機械学習ポテン シャルを用いてシミュレーションを実施したい系の温度より も高温の第一原理計算教師データを用意することである. こ れは、機械学習は内挿に対する信頼性は高いが、外挿に対す る信頼性は低いことに起因する. 高温の系は低温の系に比べ てより多様な原子配置が実現するため、高温の系の第一原理 教師データを用いることにより, より広い範囲の記述子を学 習でき、学習済み機械学習ポテンシャルを用いるシミュレー ションの構造の多くが内挿として計算が可能となるからであ る. 実際, 我々は300 K から5000 K まで第一原理分子動力 学計算を実行し、超高温の固体から液体までの構造を第一原 理分子動力学計算データに含めた. しかし, 学習済み機械学 習ポテンシャルを用いるシミュレーションにおいて教師デー タと大きく異なる構造が現れない保証はない. そのため, 一 度作り上げた機械学習ポテンシャルに対して, 我々はアダプ ティブラーニング(15)(16)と呼ばれる手法を用いて第一原理教 師データの追加を行なって改めて学習し直し、機械学習ポテ ンシャルをブラッシュアップした. この手法は,異なる人工 ニューラルネトワークの初期値もしくは微妙に異なる教師デ ータを用いて二つの BPNN を作成し、ある構造に対し二つ の BPNN の出力の差が大きければこの構造が教師データに

不足していると判断し、この構造を教師データに加え、再学習して性能を高めていく方法である。このように、最初の段階として高温系を含む第一原理分子動教師データを学習して機械学習ポテンシャルの概形を作り、アダプティブラーニングでブラシュアアップしていく方法は、少なくとも我々の経験の範囲内では非常に有効である。

次に、我々の研究⁽²⁾では、BPNNにおける対称関数のパ ラメーター $(\eta_{\alpha}, r_{s,\alpha}, \xi_{\beta}, \lambda_{\beta}, \eta_{\beta}')$ について、過大な数のパラメ ーターを用意して記述子を作り、CUR 分解(17)でその中から 情報量が多い記述子を選別した. そして, ニューラルネット ワークの構造は、隠れ層2層、各層のノード数は30とし た. 二酸化トリウムをバッキンガムポテンシャルで扱った場 合, 部分電荷を含めても11個の調整可能なパラメーターを 持つだけであるが、今の場合 BPNN は4000個以上のパラメ ーターを持つこととなる. 隠れ層や各層のユニットの数を増 やせばパラメーターの数が増え、人工ニューラルネットワー クの表現力が上がる. しかし, 上がったが故に教師データに 過剰にフィッティングしてしまい, 汎化性能が落ちてしまう 「過学習」を引き起こす可能性が出てくる. そのため, 隠れ 層や各層のノード数を適切な数に調整する必要があるが、現 状では、隠れ層や各層のノード数を決める方法はなく、決定 のためには試行錯誤が必要である.

上記は、BPNNが第一原子計算結果を正確に再現するための条件について述べてきたが、実験に対するBPNNの精度の限界は第一原理手法自体の精度により規定される。そこで我々の研究では幾つかの交換相関汎関数を用いた複数のBPNNを作成し、実験データとの総合的な比較を行った⁽²⁾. 具体的には、局所密度近似(local density approximation, LDA) ⁽¹⁸⁾, PBEsol 一般化勾配近似(generalized gradient approximation, GGA)交換相関汎関数 ⁽¹⁹⁾, また近年開発された strongly - constrained and approximately - normed (SCAN) meta-GGA 交換相関汎関数 ⁽²⁰⁾の 3 つの交換相関汎関数を用いて教師データを作成した。本稿では LDA, PBEsol, SCAN を用いた第一原理教師データから作成したBPNNをそれぞれ BPNN-LDA, BPNN-PBEsol, BPNN-SCAN と呼ぶことにする.

作成した BPNN の第一原理教師データに対するエネルギー, および力の二乗平均平方根誤差は, 3 meV/atom, 0.1 eV/Å 以下となった. 図 2 に BPNN の予測値と第一原理デ



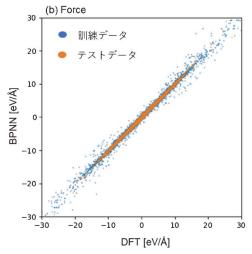


図 2 第一原理計算(SCAN)と BPNN-SCAN により得られた (a) エネルギーと (b) 力に対する散布図. 教師データの 90%を訓練データ, 10%をテストデータとしている. (オンラインカラー)

ータの値の散布図を示したが、BPNNは第一原理計算結果を高い精度で再現していることが分かる。表1には作成したBPNNにより計算された絶対零度での酸化トリウムの基本的な物性値をまとめた。弾性定数に関しては多少の誤差がでるが、BPNNと第一原理計算は概ね良く一致した。また、BPNNは実験値の格子定数・弾性定数をよく再現していると言える。ただし、これらの物性値に関しては、経験的ポテ

表 1 BPNNにより求めた格子定数と弾性定数. (*)は第一原理計算に対する誤差(%)である.

	B P N N -	B P N N -	B P N N –	実 験
	LDA	PBEsol	SCAN	
格子定数	5.529	5.576	5.610	$\begin{bmatrix} 5 \ . \ 5 \ 9 \ 2 \ [\ 2 \ 1 \] \end{bmatrix}$
[Å]	(0.04)	(0.20)	(0.21)	
C ₁₁ [G P a]	3 7 4 . 0	3 7 0 . 8	3 4 8 . 7	3 6 7 . 0 [2 2]
	(3.01)	(0.59)	(7.97)	
C ₁₂ [G P a]	1 4 2 . 2	1 2 2 . 7	1 2 4 . 2	106.0[22]
	(9.22)	(1.66)	(5.08)	
C ₄₄ [GPa]	75.9	72.9	7 4 . 3	79.6[22]
	(7.44)	(8.43)	(11.23)	

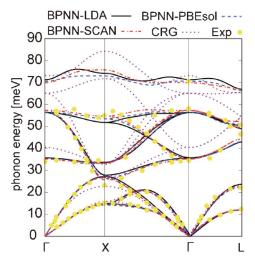


図3 BPNN, CRG ポテンシャルにより求めたフォノン分散 曲線. Exp は非弾性中性子散乱の実験値⁽²³⁾. (オンライ ンカラー)

ンシャルでも良く実験を再現できることが分かっている.これは経験的ポテンシャルが主に格子定数・弾性定数の実験値に対し、経験的ポテンシャルのパラメーターの最適化が行われていることに起因する⁽⁴⁾. 経験的ポテンシャルでは再現が難しい物性値の一つとしてフォノン分散関係が挙げられる. 図3にはBPNNと経験的ポテンシャル(CRGポテンシャル)⁽⁷⁾により計算されたフォノン分散を示した. BPNNは実験で得られたフォノン分散をほぼ完全に再現できているが、経験的ポテンシャルでは高エネルギー領域で大きなズレが生じていることが分かる.このように、BPNNは経験的ポテンシャルでは再現が難しい物性値に関しても高精度な計算を可能とする.

(2) 機械学習分子動力学法による酸化トリウムの高温物性 評価

ここまで BPNN の性能を第一原理計算,および実験との 比較を通じて示した. BPNN を用いた機械分子動力学法の 利点は,第一原理計算並みの精度を保ちながら,第一原理計 算では不可能な大規模系での計算が可能になることである. 表 2 に日本原子力研究開発機構の大型計算機 HPE SGI8600 (Intel Xeon Gold 6248R, 24 core, 3.0 GHz)の240コアを用い て機械分子動力学法を実行した際の1ステップあたりの計 算時間を示した. 324原子での第一原理計算の結果と比べる と、機械学習分子動力学は約数千倍高速であることが分かる。また、第一原理計算では実用的な時間内に計算が実行できなかった数千原子の系でも機械学習分子動力学では問題なく計算が実行できていることが分かる。核燃料物質の物性においては高温での熱伝導、相転移、融解等の詳細情報の取得が、原子炉の安全運転の観点から重要となるが、これらのシミュレーションは従来の第一原理計算では不可能なものである。以下では酸化トリウムの高温での相転移、融解現象に対し、機械学習分子動力学法を用いた高精度シミュレーションの結果を紹介する。

まず、酸化トリウムにおける高温での相転移現象に対する計算結果を紹介する。図4(a)は2592原子のシステムサイズにおいて計算された原子の平均2乗変位(mean square displacement, MSD)を示している。2000 Kではトリウム、酸素共にMSDは一定値となり、原子の拡散が起きていないことが分かる。3300 Kの超高温では、トリウムのMSDは一定値となるが、酸素のMSDが時間と共に大きく発達する。この時、図4(b)に示したように、酸素の原子位置が無秩序となり、酸素のみが融解した様な振る舞いを示す。この現象は、蛍石構造を持つ物質において融点より少し低い温度で起こることが知られており、準融解現象と呼ばれている(24)。準融解現象はブリディク転移(Bredig transition)と呼ばれ、

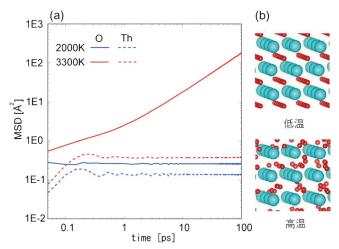


図4 (a) 機械学習分子動力学により求めた原子の平均2乗変位(mean square displacement, MSD). (b) 低温(2000 K) と高温(3500 K) での酸素原子の分布の模式図. (オンラインカラー)

表 2 240CPU コアを使用した場合の,第一原理分子動力学と BPNN を用いた機械学習分子動力学の 1 ステップあたりの計算時間. 日本原子力研究開発機構の大型計算機 HPE SGI8600 (Intel Xeon Gold 6248R, 24 core, 3.0 GHz)を使用.

原 子 数	9 6	3 2 4	2 5 9 2	6 1 4 4
L D A [s]	9.75	163.64	_	_
PBEsol [s]	9.45	156.62	_	_
SCAN [s]	22.69	7 2 0 . 0 0	_	_
B P N N – L D A [s]	0.09	0.17	0.78	1.67
B P N N – P B E s o l [s]	0.07	0.14	0.66	1.43
B P N N – S C A N [s]	0.08	0.17	0.74	1.63

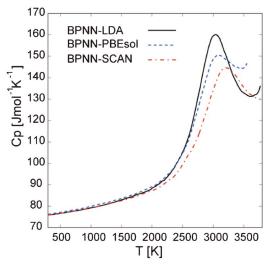


図5 機械学習分子動力学により計算された定圧比熱の温度 依存件.(オンラインカラー)

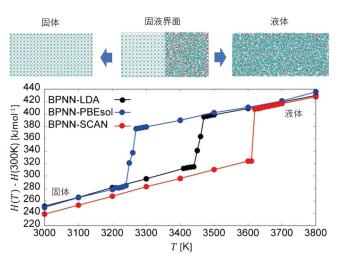


図6 上図は固液界面シミュレーションの模式図. 下図は温度に対するエンタルピー変化. (オンラインカラー)

表 3 比熱における λ 転移点温度と融点.

	B P N N - L D A	BPNN- PBEsol	BPNN- SCAN	実 験
λ 転 移 点 [Κ]	3 0 4 0	2980	3 2 0 0	$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
融 点 [K]	3 4 5 0 - 3 4 6 0	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3 6 1 0 - 3 6 2 0	3651[25]

秩序・無秩序転移の一種であり、比熱異常として観測されることが知られている。図 5 に機械学習分子動力学法による定圧比熱の計算結果を示すが、高温において綺麗な λ 型のピークが現れていることが分かる。比熱計算は第一原理計算でもフォノン分散から計算することは可能であるが、適用範囲は低温に限られる。超高温での比熱異常の計算は、大規模分子動力学計算により初めて可能になるものである。また、機械学習分子動力学により求められた比熱のピーク温度は2980-3200 K となったが(表 3 参照)、これらの結果は実験による報告値、2950 K($^{(25)}$,3090 K($^{(26)}$ をよく再現していると言える。

次に、核燃料物質の融解現象に関するシミュレーションを紹介する.図6の上図中心に示したような固体と液体が共存するような構造に対し機械学習分子動力学法を実行し、酸化トリウムの凝固・融解シミュレーションを行った。原子数は5184原子であり、シミュレーション時間は500ピコ秒である。このシミュレーションにより、図6上図に示したように、温度が低い場合は系全体が固化し、温度が高い場合は系全体が液化する挙動が計算可能であり、核燃料物質の凝固・融解における固液界面の移動速度などを求めることが可能になる。図6下図は様々な温度で計算したエンタルピーをプロットしたものである。エンタルピーがある温度で不連続にジャンプしており、この情報から融点や融解熱等を求めることできる。表3に機械学習分子動力学法により求めた融点の値と実験値(24)(25)をまとめた。BPNN-SCANは実験値を

非常に良く再現しているが、BPNN-LDA、BPNN-PBEsol は過小評価した.特に BPNN-PBEsol は 400 K 程度と大き な過小評価となった. BPNN-LDA と BPNN-PBEsol が融 点を過小評価した理由は、LDA 交換相関汎関数や GGA 交 換相関汎関数は基本的に局所的な電子相関しか取り入れてい ないため,中距離の電子相関に起因する原子間引力分散力が 大きく過小評価されたためであると考えられる.一方, SCAN meta-GGA 交換相関汎関数は電子密度の高階微分の 情報を含んでおり、中距離電子相関をある程度含んだ交換相 関汎関数となっている. その結果, 引力分散力が原子間に働 き原子間の結合を強くするため、融点が過小評価されずに実 験値を再現できたと考えられる. 今回使用した交換相関汎関 数の中では SCAN に基づく BPNN-SCAN が、酸化トリウ ムの比較可能な実験データ全てに対し、総合的に優れた結果 を示す結果した. 二酸化トリウムの超高温物性の高精度シミ ュレーションには BPNN-SCAN が非常に有望であると言え

最後に、第一原理計算の交換相関汎関数の性能検証について述べる。これまで、交換相関汎関数の性能評価は、格子定数・弾性定数・フォノン・凝縮エネルギー等を実験値と比較することにより行われてきた。これらの物理量は、第一原理計算が適用可能な小さな系で評価できるからである。しかし、これらの指標で交換汎関数の評価を行ったとしても、高温物性評価の性能までは保証されない。機械学習分子動力学は、これまで不可能だった、融点などの高温物性に対する交

換相関汎関数の性能評価を可能にする。実際,今回作成した BPNN-PBEsol は融点以外の実験値をよく再現しているが, 融点に関しては大幅な過小評価となった。機械学習分子動力 学は第一原理計算並みの高精度計算を大規模系において可能 とするが,同時に第一原理計算手法自体の課題や改善点を明 らかにするという側面を持つのである。

4. お わ り に

本稿では機械学習分子動力学法の概要と二酸化トリウムの 高温物性解析への適用に関して紹介した.機械学習分子動力 学法により,二酸化トリウムの高温物性の高精度シミュレー ションが可能となることを見て頂けたと思う.

本稿で紹介した研究 $^{(2)}$ は二酸化トリウム $^{(2)}$ を扱ったが,重要な核燃料物質としては二酸化ウラン $^{(2)}$ と二酸化プロトニウム $^{(2)}$ の $^{(2)}$ が存在する.詳しくは文献 $^{(2)}$ を参照して頂きたいが,これらの物質では価電子の局在f電子に起因する強相関電子効果が強く現れ,複雑な磁性状態等が出現する.そのため,これらの物質に対しては,低温物性でさえ第一原理計算による評価が難しい課題となる.しかし,一旦,これら二酸化ウランや二酸化プロトニウムの第一原理計算による低温物性評価方法が確立されれば,その方法を用いて大量の教師データを作成し,それを学習した機械学習分子動力学法により,超高温物性の高精度評価が可能となると期待される.計算科学による超高温における核燃料の安全性評価は一歩一歩実現に近づいている.

文 献

- (1) J. Behler and M. Parrinello: Phys. Rev. Lett., **98**(2007), 146401.
- (2) K. Kobayashi, et al: Sci. Rep, 12(2022), 9808.
- (3) M. Kato and M. Machida: Materials Science and Fuel Technologies of Uranium and Plutonium Mixed Oxide, CRC Press, (2022), 69–106.
- (4) K. Govers, et al: J. Nucl. Mater., 366 (2007), 161-177.
- (5) K. Govers, et al: J. Nucl. Mater., 376 (2008), 66–77.
- (6) S. I. Potashnikov, et al: J. Nucl. Mater., 419 (2011), 217-225.
- (7) M. W. D. Cooper, N. J. D. Rushton and R. W. Grimes: J. Phys. Condens. Matter, 26 (2014), 105401.
- (8) T. B. Blank, et al: J. Chem. Phys., 103 (1995), 4129.
- (9) J. Behler: Int. J. Quantum Chem., 115(2015), 1032.
- (10) N. Artrith and A. Urban: Comput. Mater. Sci., 114(2016), 135–150.
- (11) A. Singraber, J. Behler and C. Dellago: J. Chem. Theory Com-

- put., **15**(2019), 1827–1840.
- (12) G. Kresse and J. Hafner: Phys. Rev. B, 47(1993), 558.
- (13) G. Kresse and J. Furthmüller: Phys. Rev. B, $\mathbf{54}$ (1996), 11169–11186.
- (14) S. Plimpton: J. Comput. Phys., 117 (1995), 1–19.
- (15) V. Botu and R. Ramprasad: Int. J. Quantum Chem., 115 (2015), 1074.
- (16) Z. Li, J. R. Kermode and A. De Vita: Phys. Rev. Lett., 114 (2015), 096405.
- (17) G. Imbalzano, et al: J. Chem. Phys., 148(2018), 241730.
- (18) D. M. Ceperley and B. J. Alder: Phys. Rev. Lett., 45(1980), 566.
- (19) G. I. Csonka, et al: Phys. Rev. B, 79 (2009), 155107.
- (20) J. Sun, A. Ruzsinszky and J. P. Perdew: Phys. Rev. Lett., **115** (2015), 036402.
- (21) S. Wolf: The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements, Springer, (2006), 3273–3338.
- (22) P. M. Macedo, W. Capps and J. O. Wachtman: J. Am. Ceram. Soc., **47** (1964), 651.
- (23) K. Clausen, et al: J. Chem. Soc. Faraday Trans. II, 83(1987), 1109.
- (24) J. P. Hiernaut, G. J. Hyland and C. Ronchi: Int. J. Thermophys., 14 (1993), 609–612.
- (25) D. Fischer, J. Fink and L. Leibowitz: J. Nucl. Mater., 102 (1981), 220–222.
- (26) C. Ronchi and J. Hiernaut: J. Alloy. Compd., **240**(1996), 179–185

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★ 小林恵太

2010年 早稲田大学理工学研究科 物質材料理工学専門分野博士課程修了. 2011年 日本原子力研究開発機構 計算システムセンター 任期付研究員 2016年 量子科学技術研究開発機構 六ケ所核融合研究所 任期付研究員 2020年 日本原子力研究開発機構 計算システムセンター 任期付研究員 専門分野:物性理論,計算物質科学

◎第一原理計算と機械学習を用いた材料物性の高精度シミュレーションに従事.



__ 小林恵太



中村博樹



板倉充洋



町田昌彦



奥村雅彦

新進気鋭

熱力学過剰量に基づく 新たな金属溶液論の展開

渡 邉 学*

1. はじめに

昨年,福岡工業大学にて開催されました第171回秋期講演 大会にて第32回奨励賞を頂戴いたしました。本受賞に関し まして関係各位に厚く御礼申し上げます。今回,本紙面に受 賞した研究内容を寄稿させていただく機会を賜りましたの で,大変恐縮ではございますが,私が学部生時代から取り組 んでいる溶融金属の熱物性に関する研究についてご紹介させ ていただきます。

2. 静磁場印加電磁浮遊法

金属精錬、鋳造、溶接および Additive Manufacturing $^{(1)-(3)}$ などの金属・半導体の溶融状態を介した製造プロセスでは、熱・物質移動の数値シミュレーションを用いて最適化が検討される。この数値シミュレーションの精度を左右するのは、その材料の熱物性 (密度、表面張力、粘性係数、熱容量、熱伝導率、拡散係数など)の測定精度である。しかし、容器や基板などを用いた従来の熱物性測定では溶融金属の化学的活性が高い為、保持容器や雰囲気中の酸素などとの反応により高精度測定が困難となる。そこで、東北大学の福山博之教授を中心とする研究グループでは、電磁浮遊法と静磁場を組み合わせた新たな測定装置 PROSPECT (Properties and Simulations \underline{P} robed with \underline{E} lectromagnetic \underline{C} ontainerless Technique $^{(4)-(6)}$ の 開発に成功している。図 1 には PROSPECT の概略図を示す。筆者は、学生時代より本装置を使用し、熱物性および熱力学に関する研究を行ってきた。

ここでは、まず電磁浮遊法について説明する. 浮遊コイル

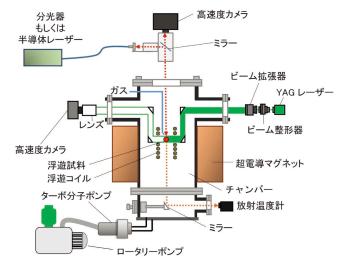


図 1 静磁場印加電磁浮遊装置(PROSPECT) ⁽⁷⁾. (オンライン カラー)

に交流電流を流し交流磁場生じさせる. すると, 試料内部の誘導電流との相互作用により, 試料内部にローレンツ力を生じ, 試料が浮遊する. さらに, 誘導電流が試料内部に流れることでジュール熱が生じ, 試料を溶融することができる. この交流磁場は常時生じているため, 試料の振動および並進運動の要因となり熱物性の高精度測定が困難になる. そこで, 超電導マグネットを用いて試料に外部から静磁場を印加し, 試料の振動, 並進運動および試料内部の対流を抑制することに成功している. この方法により高精度の熱物性測定が可能である.

182 新進気鋭

^{*} 東京工業大学物質理工学院;助教(〒226-8502 横浜市緑区長津田町4259 J3-19)

Development of a Novel Liquid Metal Solution Model Based on the Excess Thermodynamic Functions; Manabu Watanabe (Development of Materials Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology, Tokyo)

Keywords: electromagnetic levitation, thermophysical properties, excess thermodynamic functions, excess volumes, excess heat capacity 2022年12月15日受理[doi:10.2320/materia.62.182]

(1) 密度測定

溶融金属・半導体の密度は、粘性係数、熱伝導率や表面張力など他の物性算出に必要な基礎物性である。PROSPECTを用いた密度測定では、浮遊液滴の形状を正確に取得するためシャドウグラフ法を適応する(図2). YAGレーザー(532 nm)の強度分布を、ビーム整形器を用いて均一にする。その後、レーザー径をビーム拡張器で拡大し、浮遊液滴に側面方向から照射する。レーザー照射によって得られる浮遊液滴の影を高速度カメラで取得する。取得した画像内の背景と影のエッジをルジャンドル多項式でフィティングすることで試料

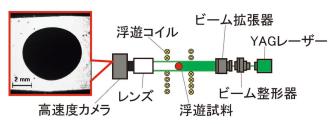


図2 浮遊液滴の影と密度測定時の光学系概略図(シャドウグラフ法). (オンラインカラー)

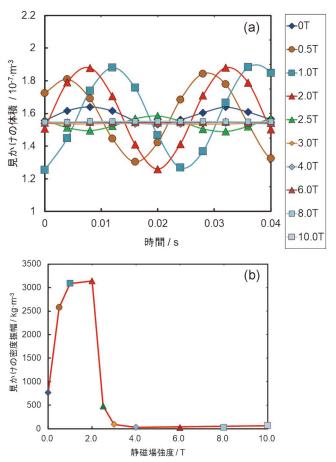


図3 (a) 溶融 Ni 1850 K における見かけの体積の時間依存性⁽⁸⁾, (b) 見かけの密度振幅の静磁場強度依存性⁽⁸⁾. (オンラインカラー)

の半径を抽出する. 浮遊液滴の体積は, 液滴が鉛直軸対称で あることを仮定し、試料の半径を用いて算出する. 質量に関 しては、実験前および実験後それぞれ測定し、平均値を用い た. 試料の温度は、下部から放射温度計を用いて測定した. 図3(a)には、溶融 Ni 1850 K における静磁場印加強度と見 かけの体積の時間依存性, および図3(b)に見かけの密度振 幅の静磁場強度依存性⁽⁸⁾を示す. 図 3(a) および(b) より、静 磁場強度4T以上で交流磁場による液滴振動が抑制され る. この結果に基づき溶融 Fe-Ni系の密度測定を4Tでお こなった. 図4には溶融 Fe-Ni系の密度の温度依存性(8)を 示す. 溶融 Fe-Ni 系の密度はすべての組成で温度に対して 直線的に減少することがわかった. また, 図4からわかる ように、電磁浮遊法をはじめとする浮遊法では容器を用いな いため, 試料の核形成が生じにくく, 融点および液相線温度 より100℃以下の過冷却領域まで液体状態を保持することが でき、幅広い温度範囲で熱物性を測定することが可能である.

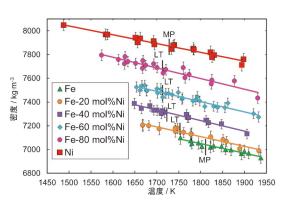


図 4 溶融 Fe-Ni 系の密度の温度依存性⁽⁸⁾, 図中の MP: 融点, LT: 液相線温度. (オンラインカラー)

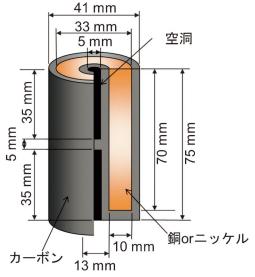


図 5 疑似黒体の概略図⁽⁹⁾. (オンラインカラー)

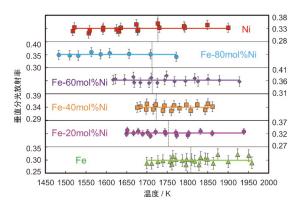


図 6 溶融 Fe-Ni 系の垂直分光放射率の温度依存性⁽⁹⁾, 融点 もしくは液相線温度(黒の点線). (オンラインカラー)

(2) 垂直分光放射率測定

放射率は、試料の熱放出の指標となる重要な物性である. また(3)節で紹介するが、福山教授の研究グループでは、溶融金属・半導体の熱容量および熱伝導率を測定するために、レーザー周期加熱カロリメトリー法(5)(6)を開発した. このレーザー周期加熱カロリメトリー法の適応時、キルヒホッフ則に基づいて放射率を、試料の吸収率として使用する. 垂直分光放射率測定では、浮遊溶融している試料輝度のカウント数を分光器で測定する. また分光器は、事前に図5で示すカーボン製の疑似黒体を用いて銅の融点(1357.8 K)および Ni-C系の共晶温度(1599.7 K)で校正した. 図6に、溶融 Fe-Ni系の垂直分光放射率の温度依存性を示す. 溶融 Fe-Ni系の垂直分光放射率では、過冷却領域を含めて明確な温度依存性は確認されなかった.

(3) レーザー周期加熱カロリメトリー法

福山教授の研究グループでは、レーザーによる試料の周期加熱とそれに伴う試料の温度応答から、溶融金属・半導体の定圧熱容量および熱伝導率を測定できるレーザー周期加熱カロリメトリー法(図7)を確立した(5)(6). このレーザー周期加熱カロリメトリー法を前述の静磁場印加電磁浮遊法を組合わせることで、溶融試料の熱容量および熱伝導率の非接触測定が可能である。本稿では、定圧熱容量のみ紹介する。溶融Fe-Ni系の定圧熱容量の温度依存性を図8に示す。溶融Fe-Ni系の定圧熱容量には明確な温度依存性がみられなかった。図9には溶融Fe-Ni系の定圧熱容量の組成依存性を示す。実験結果は、理想溶液よりも全組成範囲で大きな値を示している。この実験値と理想溶液の差が過剰定圧熱容量(CF)であり、熱力学過剰量については3節で説明する。

3. 熱力学過剰量と金属溶液論の提唱

前述の CF をはじめ、熱物性および熱力学の過剰量は、材料の混合もしくは合金化によって現れ、混合した元素によって過剰量の符号、大きさともに異なることから、議論するこ

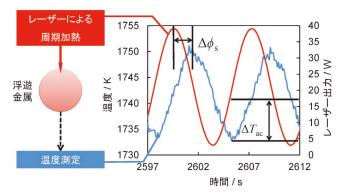


図7 レーザー周期加熱カロリメトリー法の概略図 $^{(4)}$, 位相 差 (Δ_{θ}) , 温度振幅 (ΔT_{ac}) . (オンラインカラー)

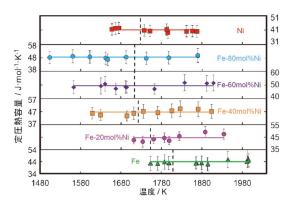


図 8 溶融 Fe-Ni 系の定圧熱容量の温度依存性⁽⁴⁾⁽⁹⁾. (オンラインカラー)

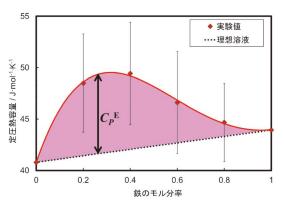


図 9 溶融 Fe-Ni 系の定圧熱容量の組成依存性⁽⁴⁾⁽⁹⁾. (オンラインカラー)

とは非常に興味深い、一般に熱力学的過剰量 $(X^{\rm E})$ は、溶液における物理量(X)の混合量 $\Delta_{\rm mix}X$ と理想溶液の混合量 $\Delta_{\rm mix}X^{\rm ideal}$ の差 $(X^{\rm E}=\Delta_{\rm mix}X-\Delta_{\rm mix}X^{\rm ideal})$ として定義される非理想性の尺度である。

定圧熱容量の場合, $\Delta_{\rm mix}C_P^{\rm ideal}=0$ となる為,実験値と理想溶液との差が $C_P^{\rm E}$ である. $C_P^{\rm E}$ は,過剰エンタルピー $(H^{\rm E})$ と過剰エントロピー $(S^{\rm E})$ を用いて以下のように表すことができる.

$$C_P^{\rm E} = \frac{\partial H^{\rm E}}{\partial T} \tag{1}$$

184 新進気鋭

$$=T\frac{\partial S^{E}}{\partial T}\tag{2}$$

したがって、 H^E と S^E は温度で積分することで推定することができる。1700、1873および 2000 K における溶融 Fe-Ni 合金の H^E と S^E の組成依存性、およびそれらの結果から計算した過剰ギブズエネルギー(G^E)の組成依存性を図10に示す。その結果、 H^E と S^E は温度増大とともに理想溶液に近づいていることから、"温度上昇によって過剰関数は理想溶液に近づく"とされる、Lupis-Elliott 則(15)に従っている。一方で、 G^E の 1700~2000 K の温度範囲内では、ほとんど変化は見受けられなかった。これについては、本来、Lupis-Elliott 則はすべての過剰関数に適応でき、測定試料の温度が無限に大きい場合、 C^E も 0 となるはずである。しかし、今回測定した温度範囲内では定圧熱容量に明確な温度依存性がみられなかった。その為、 C^E には温度依存性がなく、全組成範囲で正の値を示すと仮定して計算しているため、 G^E にも明確な温度依存性が見受けられなかったと考えられる。

図 4 で示した溶融 Fe-Ni 合金の密度から算出した 1873 K

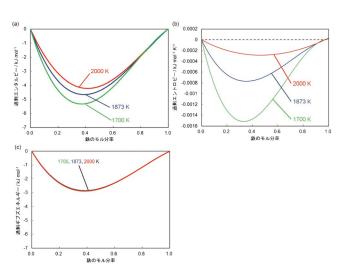


図10 溶融 Fe-Ni 系の (a) 過剰エンタルピー $^{(9)}$ (14), (b) 過剰エントロピー $^{(9)}$ (14), (c) 過剰ギブズエネルギーの組成依存性 $^{(9)}$. (オンラインカラー)

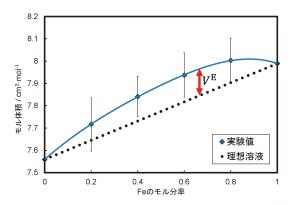


図11 溶融 Fe-Ni 合金 1873 K のモル体積の組成依存性⁽⁸⁾ . (オンラインカラー)

におけるモル体積の組成依存性を図11に示す. 図11からわ かるように、溶融 Fe-Ni 合金のモル体積は、理想溶液より も大きな値を示している. モル体積の場合も $\Delta_{
m mix}V^{
m ideal}=0$ となる為,実験値と理想溶液との差が過剰体積(VE)であ る. 従来, 溶融金属の VE は Iida と Guthrie (16) によって提 唱された「化合物を形成する2元系合金の過剰エンタルピ ーは負を示し、過剰体積も負となる. 一方、非混和性を示す 場合は、過剰エンタルピーは正を示すことで過剰体積も正を 示す」に従うとされてきた. しかし, 1873 K における溶融 Fe-Ni系のH^Eの組成依存性は全組成範囲で負を示す⁽⁸⁾た め、溶融 Fe-Ni 系には従来の溶液モデルは適応できない. そこで我々は、新たな溶液モデルとしてエントロピー項も考 慮できる G^{E} を用いて、 V^{E} との相関をとることを提唱し た $^{(8)(10)-(13)}$. 図12 および表 1 には、モル分率0.5における溶 融 2 元系合金の V^{E} と G^{E} の相関性を示す. 溶融 Fe-Ni の場 合、 G^{E} も H^{E} と同様に全組成範囲で負の値を示した. しか し、図12のプロットは、状態図等に基づいて大まかに4つの グループに分けることができる.

グループ 1(Gr. I)は過冷却状態で相分離を生じる系である. G^E が正の値を示すように,異種原子間には斥力相互作用が主に生じている為,異種原子同士が離れようとする.特に過冷却状態では相分離を示すほど斥力相互作用の強さは顕著になる.この斥力相互作用により異種原子間の距離が広がることで $V^E>0$ となると考えられる.グループ 2(Gr. II)は温度上昇に伴いコングルエント溶融を生ずる金属間化合物を有する系である.Gr. II に属する系では,金属間化合物を有することから異種原子間相互作用は主に引力が支配的であり,液体状態においても引力相互作用が生じている為 $G^E<0$ となる.また,引力相互作用により異種原子同士が接近することで $V^E<0$ になると考えられる.

グループ 3 (Gr. III) は共晶反応もしくは固体状態で miscibility-gap を有する系である. Gr. III に属する系の液体状態における異種原子間の相互作用は、等価もしくはわずかに斥力が強いため $G^E \ge 0$ となっている. また、Gr. III に属す

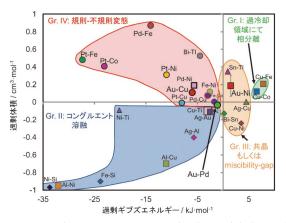


図12 モル分率0.5における溶融2元系合金の過剰体積と過剰 ギブズエネルギーの相関⁽¹³⁾. (オンラインカラー)

表 1 モル分率0.5における溶融2元系合金の過剰体積と過剰ギブズエネルギーの相関 $^{(13)}$.

合金系	温度 / K	過剰体積 / cm³·	過剰ギブズエネルギー
		mol ⁻¹	/ kJ·mol⁻¹
Au-Cu	1550	0.11	-6.00
Au-Pd	1850	-0.04	-1.09
Au-Ni	1450	0.19	1.51
Ag-Al	1173	-0.40	-5.69
Ag-Au	1350	-0.11	-2.51
Ag-Cu	1428	0.00	4.47
Al-Cu	1373	-0.70	-11.1
Al-Ni	1873	-0.95	-32.1
Bi-Sn	a=573,	-0.13a	0.19 ^b
BI-SN	b=608	-0.13"	0.19
p: TI	c=673,	0.520	4 46d
Bi-Tl	d=732	0.53°	-4.46 ^d
Cu-Co	1823	0.12	6.54
Cu-Fe	1873	0.21	7.81
Cu-Ni	1750	-0.24	3.52
Fe-Ni	1873	0.12	-2.55
Fe-Co	1873	0.00	-1.69
Fe-Si	1873	-0.90	-23.9
Ni-Si	1873	-0.97	-33.7
Sn-Tl	e=673, f=700	0.35e	0.92 ^f
Pd-Fe	1823	0.87	-14.1
Pd-Cu	1873	0.07	-2.97
Pd-Ni	1873	0.19	-5.63
Pt-Fe	1880	0.48	-29.2
Pt-Co	1850	0.41	-23.1
Pt-Ni	1873	0.31	-11.0
Pt-Cu	1900	-0.01	-8.00
Ti-Cu	1496	-0.10	-2.98
Ti-Ni	1773	-0.09	-20.2

る系の異種原子間相互作用の大きさは、Gr. I および II に属 する系と比べると大きくはない. その為, 原子間相互作用だ けでなく、原子の半径の違い等も要因となり V^E は決まると 考えられる. グループ 4(Gr. IV) は固相で規則—不規則変態 を生じる系である. すなわち, Gr. IV に属する系では, 固 体の低温状態で金属間化合物を有するが、温度上昇とともに 分解して固溶体を形成する. これらの系の異種原子間相互作 用は、固溶体および液体状態においても引力相互作用が主で ある為 G^{E} <0となっている. Gr. IV に属する系では、引力 相互作用が支配的であるにもかかわらず、 $V^{E}>0$ となって おり,原子間距離などの前述の議論では解釈が困難であり, 未だ結論には至っていない. そこで, 現在, 筆者は Gr. IV に属する系について、電子状態の観点から G^{E} および V^{E} の 要因について明らかにしたいと考えており、放射光施設 SPring-8 を利用した光電子分光測定および第一原理計算を 組み合わせて研究を行っている.

4. お わ り に

これまでの私の研究は、私一人では進めることはできず、大変多くの方のお力添えによるものです. 特に、学生時代か

ら東北大学 福山博之先生、安達正芳先生、学習院大学 渡 邉匡人先生、JAXA 石川毅彦先生方には大変お世話になっ ております。この場をお借りし、厚く御礼申し上げます。ま た、私は、溶融金属の研究は、実験を行うたびに新たな知見 が得られる非常に興味深い研究分野だと考えており、引き続 き粘り強く研究を遂行したいと考えております。そのため、 今後も日本金属学会の活動には、積極的に参画していきたい と考えておりますので、学会員の皆様には引き続きご指導、 ご鞭撻のほど何卒よろしくお願いいたします。

文 献

- (1) M. Okugawa, Y. Furushiro and Y. Koizumi: Materials, 15 (2022), 6092.
- (2) S. Aota, K. Yamanaka, M. Mori, N. Sasaki, J. Adrien, E. Maire, D. Fabrègue and A. Chiba: Add. Manuf., 59(2022), 103134.
- (3) G. Li, T. Yu, P. Wu and M. Chen: Materials, 16 (2023), 409.
- (4) 福山博之,渡邉 学:まてりあ,58(2019),622-626.
- (5) H. Kobatake, H. Fukuyama, I. Minato, T. Tsukada and S. Awaji: J. Appl. Phys., 104 (2008), 054901.
- (6) H. Fukuyama, H. Kobatake, K. Takahashi, I. Minato, T. Tsukada and S. Awaji: Meas. Sci. Tech., 18(2007), 2059–2066
- (7) M. Watanabe, Y. Takahashi, S. Imaizumi, Y. Zhao, M. Adachi, M. Ohtsuka, A. Chiba and Y. Koizumi: Therm. Acta, 708 (2022), 179119.
- (8) M. Watanabe, M. Adachi and H. Fukuyama: J. Mater. Sci., **51** (2016). 3303–3310.
- (9) M. Watanabe, M. Adachi and H. Fukuyama: J. Mater. Sci., 52 (2017), 9850–9858.
- (10) M. Watanabe, M. Adachi and H. Fukuyama: J. Chem. Therm., **130**(2019), 9–16.
- (11) M. Watanabe, M. Adachi, M. Uchikoshi and H. Fukuyama: Fluid Phase Equilibria, 515 (2020), 112596.
- (12) M. Watanabe, M. Adachi and H. Fukuyama: J. Mater. Sci., **54** (2019), 4306–4313.
- (13) M. Watanabe, M. Adachi and H. Fukuyama: J. Mol. Liq., **348** (2022), 118050.
- (14) H. Fukuyama, M. Watanabe and M. Adachi: HTHP, **49** (2020). 197–210.
- (15) C. H. P. Lupis and J. F. Elliot: Trans. Met. AIME, **236**(1966),
- (16) T. Iida and R. I. L. Guthrie: The Physical Properties of Liquid Metals, (1988) Oxford.



★★★★★★★★★★★★★★★★★★渡邉 学

2018年 東北大学大学院環境科学研究科 博士後期課 程修了 博士(学術)

同年 4月日本学術振興会特別研究員(PD)

同年 8月-現在 高輝度光科学研究センター外来 研究員 兼任

2020年4月 現職

専門分野:高温材料物理化学

◎高温金属融体を中心に、熱力学、熱物性および電子物性に関する研究に従事.

186 新 進 気 鋭

講義ノート

金属腐食の概要と局部腐食 Ⅲ ~腐食の局所化~

篠原 正*

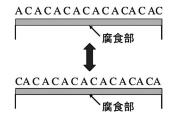
3.1 は じ め に

金属材料とそれがさらされている環境の組み合わせは多種 多様であることから、考慮すべき腐食形態やその機構も多岐 にわたる.これまでの講義(1)(2)では、主に腐食が均一に進む 場合の腐食挙動や耐食性について述べてきた.この場合に は、腐食速度を見積もることができれば寿命予測も行なえ、 "腐食しろ"で対処できる.しかし、腐食損傷が問題となる 事例の多くは、腐食が局所化し不均一に進む場合である.こ の場合には、その最大侵食深さが問題となり、寿命は発生ま での時間(誘導時間)と貫通に至るまでの進展時間との和とな る.本稿では、腐食が不均一に進む腐食形態について、実例 を挙げつつ解説する.

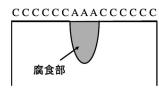
3.2 均一腐食と不均一腐食

海水中や酸性水溶液中の鉄の腐食などでは、図3.1(a)に示すように、通常アノードとカソードは非常に微小で互いに混在しており、その位置も経時的に変化する.したがって腐食はほぼ均一に進行し、このような腐食形態を均一腐食(ミクロセル腐食)という.これに対して、なんらかの理由でアノードとカソードが場所的に分離し、アノード部でのみ腐食が進行する腐食形態(図3.1(b))を不均一腐食(マクロセル腐食)という.不均一腐食のうち、金属表面のほとんどが不動態化していて、特定の箇所(アノード)のみが腐食する形態(孔食、粒界腐食、すきま腐食、など)を局部腐食という.

いま,アノードおよびカソードの面積を $S_{\rm A}$ および $S_{\rm C}$ とすると,カソード反応とアノード反応の全体量同士は等しい



A: アノード C:カソード



(a) 均一腐食(ミクロセル腐食)

(b) 不均一腐食(マクロセル腐食)

図3.1 均一腐食(ミクロセル腐食)と不均一腐食(マクロセル腐食).

ので,

$$i_{\rm A}S_{\rm A}=i_{\rm C}S_{\rm C}$$

が成り立ち、これを変形すると

$$i_{\mathbf{A}} = i_{\mathbf{C}}(S_{\mathbf{C}}/S_{\mathbf{A}}) \tag{4}$$

となる. 均一腐食では $S_A=S_C$ であるので, $i_A=i_C$ である. 不均一腐食では,腐食速度 (i_A) は (S_C/S_A) に依存し,特に (S_C/S_A) が非常に大きい場合-カソード部に対してアノード部 (腐食が起こっている部分) の面積が小さい場合-には腐食がアノード部に集中するために,腐食速度 (i_A) は非常に大きくなる.

均一腐食が、金属表面全体が均一の速度で腐食していくのに対して、全面腐食は、金属表面全体が腐食していれば、腐食面が不均一であっても構わない。すなわち、不均一腐食に分類される全面腐食もある。また、孔食が多数発生し、これが横方向に広がってつながっても全面腐食となる(3.3.4節参照)。

Corrosion and Protection of Metals III ~Localization of Corrosion~; Tadashi Shinohara(Formerly, National Institute for Materials Science, Tsukuba)

Keywords: carbon steel, stainless steel, micro-cell corrosion, macro-cell corrosion, galvanic corrosion, differential aeration corrosion, pitting, intergranular corrosion

2022年5月16日受理[doi:10.2320/materia.62.187]

^{*} 元,物質·材料研究機構

3.3 実際の不均一腐食

3.3.1 異なる金属あるいはイオンの組み合わせによる腐食

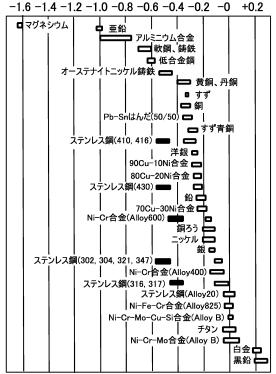
(a) 異種金属接触腐食

異種金属接触腐食は,"異なる種類の金属材料が電気的に接触し腐食環境中で相互に影響し合って生じる腐食現象"⁽³⁾である.いま,金属 M_1 および M_2 の自然腐食状態における電極電位を E_1 および E_2 とし,金属 M_1 の電位の方が高い $(E_1 > E_2)$ とする.両者を接続した場合の電位 $(E: R_1)$ 混成電位 は E_1 と E_2 の間 $(E_1 > E > E_2)$ になるので,金属 M_1 では電位が低下 $(E_1 > E)$ することでその腐食が抑制され,金属 M_2 では電位が上昇 $(E > E_2)$ することでその腐食が促進される.後者の電位の低い金属 (M_2) における腐食促進が異種金属接触腐食であり,前者の電位の高い金属 (M_1) における腐食抑制がカソード防食である.

異種金属接触腐食における腐食速度は、両金属間の電極電位差(E_1 - E_2)が大きいほど大きくなる⁽³⁾. 表3.1は種々の金属の電位列を示したものであり、異種金属接触腐食を抑制するには、それらのうち電位差の小さい金属同士の組み合わせを採用することが有効である。また、腐食速度は、金属間の液抵抗が小さいほど大きいので、両金属が近接している(距離が小さい)ほど、水溶液液の電気伝導率が大きいほど(溶液の濃度が高いほど)、大きくなる⁽³⁾. 図3.2はそれを示した例

表3.1 海水中での金属・合金の自然電位列(文献(3)を編集).

電位 (V vs. SCE)



測定条件:流速2.4~4.0m/s, 温度11~27°C ■■: 腐食態の電位

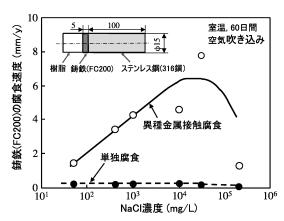


図3.2 異種金属接触腐食速度におよぼす NaCl 濃度の影響(文献(4), (5)を編集).

で、静止水溶液中における鋳鉄(FC200)/ステンレス鋼(316鋼)-対の、鋳鉄の腐食におよぼす NaCl 濃度の影響を示したもの $(4)^{(5)}$ である。NaCl 濃度の増加とともに電気伝導率が上昇し、それに伴い鋳鉄の異種金属接触腐食が増加している。一方、鋳鉄単独の腐食の場合はミクロセル腐食であるため溶液抵抗の影響は小さく、NaCl 濃度(電気伝導率)が増しても腐食速度はほとんど変わらない。図3.2において NaCl 濃度が 2×10^5 ppm で異種金属接触腐食、単独腐食共に腐食速度が減少するのは高塩濃度のために酸素の溶解量が減少するためである。

(b) イオン化傾向の差による腐食

Alはイオン化傾向が大きい金属として知られており、イオン化傾向の小さい金属のイオン(例えば Cu^{2+} や Fe^{2+} など)の存在に敏感である。図3.3は、Alの熱伝導性が良いことを利用した、石英ガラス製反応管冷却器の模式図である。冷却器の中は中空になっていて、ここに冷却水を通す。冷却水は Cu 製容器に溜められており、Cu と Al との異種金属接触腐食を防ぐために、両者をビニールチューブで繋いた。しかし、Cu と Al とを絶縁したにもかかわらず Al 製冷却器に腐食が生じた。Cu 製容器は大気開放であったために溶存酸素によって銅が腐食し;

$$1/2$$
 $O_2 + H_2O + 2e^- \longrightarrow 2OH^- (カソード反応)$ $Cu \longrightarrow Cu^{2+} + 2e^- (アノード反応)$

これによって生成した Cu^{2+} がビニールチューブ内を流れて Al 製冷却器まで達し,

$$2Al + 3Cu^{2+} \longrightarrow 2Al^{3+} + 3Cu$$

という反応によって、A1製冷却器に腐食が生じたと考えられる。上式の反応は速いので、腐食は冷却水流入口に集中するため(S_A が小さいので、 S_C/S_A が大きくなるため)、腐食速度が極めて大きくなり、短期間で貫通した。

3.3.2 通気差腐食(酸素濃淡電池腐食)

鉄を浸漬した当初は、水線付近および水溶液中の溶存酸素 還元反応全体で、鉄全体がほぼ均一に溶解する(図3.4(a)).

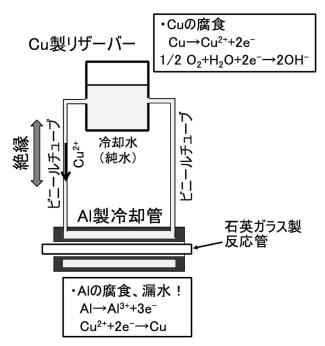


図3.3 Al 製冷却管に生じた腐食事例の概略図.

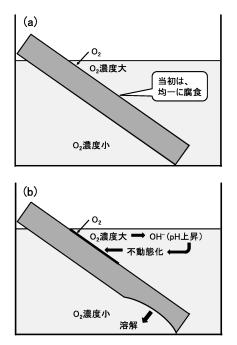


図3.4 通気差腐食(酸素濃淡電池腐食)の模式図. (a)浸漬初期,(b)十分に時間が経った後.

こうしてある程度時間が経つと、水線近くではより大きなカソード反応(溶存酸素還元)が進み、OH-濃度が上がりpHが上昇する.そしてついにはpH>9.5~10となってこの部分の鉄は自己不動態化する.こうなると、この部分では鉄はほとんど腐食せず、実質的にカソード反応のみが起こり、腐食は水溶液中の部分に集中する(図3.4(b)).このように、溶存酸素の濃度差(通気差)に伴う電位差によって進行する腐食形態を通気差腐食(酸素濃淡電池腐食)と呼ぶ.通気差腐食において「溶存酸素濃度の低い方で腐食が進む」(あるいは

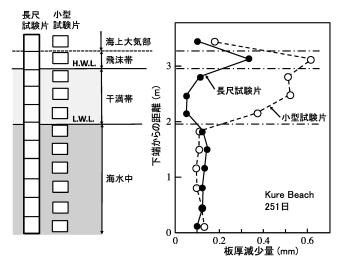


図3.5 海洋環境における鋼材の腐食.(板厚減少量:重量減から計算,文献(6)を編集).

「溶存酸素濃度の高い方では腐食が進まない」)のは、溶存酸素濃度の高いところでは溶存酸素還元反応によって pH が上昇するという環境変化によって、その部分の鉄が不動態化するためである.

図3.5は、縦方向に連続した長尺試験片と互いに絶縁され た小型試験片(図3.2の単独腐食に相当)を海洋環境(海水中~ 干満帯~飛沫帯~海面上大気)に設置し、各位置での腐食量 を調べた結果(6)(7)である. 飛沫帯では鋼表面を覆った薄い海 水の膜を通して大気中の酸素が豊富に供給されるため、海水 中と比べて腐食速度が大きくなる. 干満帯では、周期的に飛 沫帯となることと, 浸漬状態でも海表面近くで溶存酸素が豊 富であることから、小型試験片(単独腐食)では腐食が大き い. これに対して、長尺試験片では、海表面直下(および飛 沫帯)がカソード、それよりも下方の埋没部分がアノードと なる通気差電池が形成されるため, 干満帯の腐食は抑制され 干潮面下付近の腐食は促進される(通気差腐食). 飛沫帯も酸 素の供給が大きいが、表面を覆う水膜が薄いために溶液抵抗 が大きくマクロセルによる腐食抑制効果が小さい. このた め,常時飛沫帯となる満潮面(H.W.L.)より上部は長尺試験 片でも腐食が大きくなっている.

通常の構造体では図3.5中の長尺試験片のように金属が連続している(電気的導通がある)ので、その腐食状況を調べる際に単に小型試験片を設置するだけだと、腐食機構の解釈(図3.5中の通気差腐食と単独腐食)を誤ってしまう可能性があるので注意を要する.

3.3.3 いわゆるマクロセル腐食

マクロセル腐食については、従来から「同じ材質(例えば鉄)の構造材に対して、環境の違いにより、巨視的な電池(アノード/カソードの分離)が形成されることによって起こる腐食形態」とされてきた。現在では、3.2節で述べたように、サイズに関係なく、「アノード/カソードの分離によって起こる腐食形態」をマクロセル腐食と呼んでいる。本稿では、従

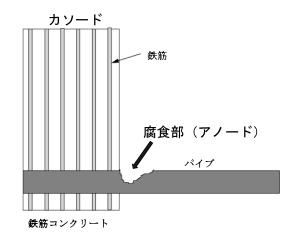


図3.6 鋼管がコンクリート構造物を貫通して土壌中に布設されている箇所の模式図.

来からの「巨視的な電池形成による腐食形態」として解説する.

図3.6iは,鋼管がコンクリート構造物を貫通して土壌中に布設されている箇所の模式図である。コンクリートの中の鋼管は強アルカリ性のために不動態化している。そのため,コンクリート中がカソード,中性である土壌中の部分がアノードとなることで,アノード/カソードの分離が起き,アノードで腐食が進む。一般的に鋼管はコンクリート中の鉄筋に固定されているので,電気的に接続されている。その鉄筋も強アルカリ性のために不動態化しているので,コンクリート内の鉄筋と鋼管とからなる大きなカソードが形成されることで $(S_{\rm C}/S_{\rm A})$ が非常に大きくなり,土壌中腐食部での腐食速度 $(i_{\rm A})$ が極めて大きくなる。

あるビルで、消火訓練で消火栓からの放水をおこなったと ころ, 水が出ないという事例があった(図3.7(a)). 地下の貯 水槽を確認したところ、逆流防止弁を含む揚水管が腐食して 脱落していた. 消防法では、マクロセル腐食が生じないよう に、ポンプは鉄筋に固定してはいけないことになっている. 実際, フランジ2 および3を外して, ドアの枠(鉄筋に固定 され、電気的に導通している)とポンプとの導通を調べる と、両者は絶縁されていた.しかし、フランジ3から先の 配管が振動防止のために鉄筋に固定されていたため、地下水 槽内鉄筋→ドアの枠→壁内鉄筋→配管→フランジ3→ポン プ→フランジ2→揚水管という, まさにビルサイズのマク ロセルが形成され、揚水管(アノード)/貯水槽内鉄筋(カソー ド)として揚水管が腐食したと考えられる.マクロセル腐食 は、上記の電気的導通を遮断すれば防げるので、フランジ2、 3や配管と壁内鉄筋の固定部に絶縁性のものを挟むか、ある いは揚水管に防食塗装を施せばよい.

3.3.4 孔食

図3.8は、塩化物イオン(Cl⁻)を含む中性〜弱アルカリ性 水溶液および強アルカリ水溶液中における鉄のアノード分極 曲線の模式図である.不動態域の電位が高いところで急激に

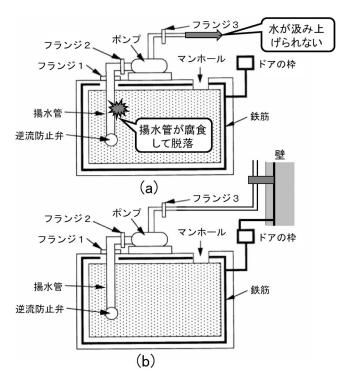


図3.7 腐食事例があった貯水槽周辺の概略図. (a) 事故の概略,(b) 実際の配管.

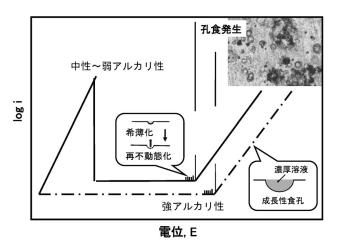


図3.8 塩化物イオン(Cl-)を含む中性〜弱アルカリ性水溶液および強アルカリ性水溶液中における鉄のアノード分極曲線の模式図.

アノード電流が大きくなる。 CI^- は不動態皮膜に対して攻撃性を有するイオンとして知られている。電位がさほど高くない場合には、 CI^- によって攻撃され損傷した不動態皮膜もただちに修復される(再不動態化)。しかし、電位が十分に高い場合には、損傷した不動態皮膜が修復される前に鉄の溶解が進んでしまう。この腐食部以外は不動態を保っているので、腐食は腐食発生部に集中し、孔状の形態をとる(成長性食孔、図3.8中写真)。このような孔状の腐食形態を孔食といい、腐食している孔そのものを食孔という。食孔内部では鉄イオン(Fe^2+)の加水分解反応

$$Fe^{2+} + H_2O \longrightarrow Fe(OH)^+ + H^+$$

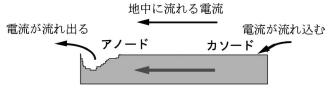


図3.9 迷走電流腐食の模式図.

によって H^+ が生成されるために pH が低下する.このため 鉄は不動態化できず,腐食(食孔の成長)が継続する.鉄筋コンクリートにおいて CI^- が問題視されるのは,強アルカリ環境で鉄筋が不動態化していたとしても,不動態皮膜の破壊に伴う孔食の発生,さらには食孔がつながり全面腐食へと進むからである.

実機で孔食そのものが問題となる(孔状のまま腐食が進行する)のは、不動態化金属として知られるステンレス鋼やアルミニウム合金などの場合である。ステンレス鋼での孔食については、3.4.2節で解説する.

3.3.5 迷走電流腐食

媒体中(例えば土壌中)に電流が流れていて、その電流の向 きに鉄棒(あるいは鉄管)を設置したとする(図3.9). このよ うに媒体中に流れている電流を迷走電流という. 電気抵抗は 媒体に比べて鉄棒(鉄管)の方がはるかに小さいので、迷走電 流の一部は鉄棒(鉄管)を流れる.ここで、土壌/鉄棒(鉄管) 界面での電流の向きに着目すると, 迷走電流の上流側では土 嬢→鉄棒(鉄管)の向きに流れ、迷走電流の下流側では鉄棒 (鉄管)→土壌の向きに流れる. 腐食反応で考えると、金属の 腐食(溶解)は、金属イオン(カチオン)が金属から媒体へ移動 する,すなわち金属→媒体の向きの電流である.これは、図 中で迷走電流の下流側における電流の向きであるので、そこ (迷走電流下流側)がアノードとなって腐食が進行する. 逆 に、迷走電流上流側で電流が土壌から鉄棒(鉄管)へ流れ込む 箇所はカソードになる. このような腐食が生じるためには, アノードとカソードとを分離させるために、鉄棒(あるいは 鉄管)にある程度の長さ(数 m あるいはそれ以上)が必要であ る.

3.4 ステンレス鋼の局部腐食

3.4.1 ステンレス鋼

鉄にステンレス鋼の主成分の一つである Cr を添加すると表面に Cr_2O_3 が生成され、Cr 添加量が増すほど活性態でのピーク電流密度が小さくなり、中性あるいは酸性環境においても不動態化するようになる(図3.10). Cr はフェライト安定化元素であり、Mo, Si, Nb などもフェライト相を安定化する. 一方、もう一つの主成分である Ni はオーステナイト安定化元素であり、C, Mn もオーステナイト相を安定化す。そこで、フェライト安定化元素としての度合いを示すCr 当量(=%Cr+%Mo+1.5×%Si+0.5×%Nb)と、オース

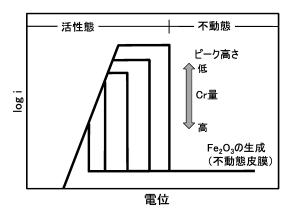


図3.10 ステンレス鍋の活性態ピーク電流密度におよぼす Cr の影響の模式図.

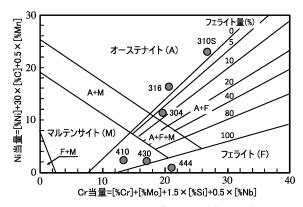


図3.11 シェフラーの組織図(文献(8)を編集).

テナイト安定化元素としての度合いを示す Ni 当量(=%Ni+30×%C+0.5×%Mn)を、それぞれ横軸(Cr 当量)と縦軸(Ni 当量)にとって室温での溶接金属組織と対応させたのがシェフラーの組織図(®)(図3.11)である。図3.11に示すように、ステンレス鋼は金属組織から、マルテンサイト系ステンレス鋼、フェライト系ステンレス鋼、オーステナイト系ステンレス鋼に分類される。図3.11中には代表的なステンレス鋼についてもプロットした。

マルテンサイト系ステンレス鋼は、常温でマルテンサイトを主要な組織として持ち、410鋼(13%Cr)などが代表的なものである。耐食性と合わせて高い強度と耐摩耗性を持つため、刃物、タービンのブレード、軸受などで使われる。フェライト系ステンレス鋼は、Niを含まないため比較的安価で、応力腐食割れを起こしにくい、などの特徴を持っており、430鋼(17%Cr) や4444鋼(19%Cr-2%Mo) などが代表的なものである。これに対し、オーステナイト系ステンレス鋼は、耐食性だけでなく加工性に優れ、極低温まで靱性を保持しているので、きわめて広い範囲の用途があり、304鋼(18%Cr-8%Ni)、316鋼(12%Cr-12%Ni-2%Mo) や310S 鋼(25%Cr-20%Ni) などが代表的なものである。二相系ステンレス鋼はオーステナイト相とフェライト相からなるステンレス鋼であり、329J4L 鋼(25%Cr-6%Ni-3%Mo-N) などが代表的なも

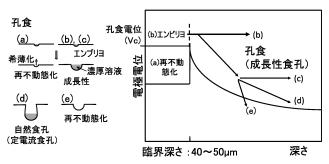


図3.12 孔食発生の模式図.

のである. 両相の良いところを持ち合わせて、優れた強度と 耐食性を有していることから、化学プラントや海水機器等の 幅広い用途で使用されている.

3.4.2 孔食

ステンレス鋼の不動態皮膜に対しても Cl^- は攻撃性を有するイオンとして働く、電位がさほど高くない場合には、 Cl^- によって攻撃され損傷した不動態皮膜もただちに修復される(再不動態化性食孔: 図3.12(a)). しかし、電位が十分に高い場合には、損傷した不動態皮膜が修復される前にステンレス鋼の溶解が進み、食孔内部では低い $pH(<pH_d)$ の濃厚溶液が生成し、食孔内部は不動態化できず、腐食(食孔の成長)が継続する(成長性食孔: 図3.12(b)). こうした成長性食孔が発生する下限界電位を孔食電位(Vc)という、成長性食孔がある程度深くなると(臨界深さ: $40\sim50~\mu m$)、濃厚溶液が薄まりにくくなり、多少電位が下がっても成長を維持できる(図3.12(c)). さらに電位を下げると、もはや濃厚溶液を維持できなくなり、食孔は再不動態化する(図3.12(e)).

実環境では、ほとんどの部分が不動態化していて、そこがカソードになるので、カソード面積一定、すなわち電流一定(定電流)の条件となる. 孔食が大きくなるとアノード面積が増えるので、定電流条件下ではアノード電流密度が小さくなり、電位が下がる. そうすると、溶解速度が小さくなって食孔開口部付近では濃厚溶液が薄まりやすくなり、その部分が不動態化し、腐食は食孔底に集中する. こうして、食孔の壁が不動態化し、底のみが溶解することで、食孔は深さ方向へ成長する(図3.12(d)).

ステンレス鋼の自由表面に個体が接触すると(この構造を『すきま』という), すきま内部は溶液が濃縮しやすいので, より温和な環境(低 Cl-濃度,低電位)においても腐食(すきま腐食)が発生・成長するため,実機では大きな問題となっている. すきま腐食については次回詳しく解説する.

3.4.3 粒界腐食

ステンレス鋼が溶接などによって加熱されると、Cr & C とが反応して粒界に Cr 炭化物(例えば $Cr_{23}C_6$)が析出する. このため、粒界近傍では Cr 濃度が減少している Cr 欠乏層が現れる $^{(9)}$ (図3.13(a)、 $^{(b)}$). この Cr 欠乏層の耐食性が低いため、粒界に沿った Cr 欠乏層の腐食が進展していく(図

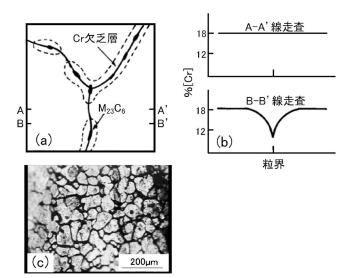


図3.13 粒界腐食の模式図(文献(9)を編集). (a) Cr 欠乏層の様子, (b) 粒界付近の元素分析(Cr), (c) レーザー顕微鏡観察.

3.13(c)). こうした Cr 欠乏層の生成を鋭敏化といい,これに伴う粒界に沿った腐食を粒界腐食という. ステンレス鋼の粒界腐食を防ぐためには,加熱後にさらに高温での熱処理を行い,Cr の拡散を十分行わせ,Cr 欠乏層を消失させる必要がある.

3.4.4 高純度フェライト系ステンレス鋼

かつては,製鋼過程で C 量を十分に低減することができず,このため Cr 量を多くすることができなかったため,フェライト系ステンレス鋼はオーステナイト系ステンレス鋼に比べて耐食性が劣るとされて来た.1970年頃よりステンレス鋼の精錬技術が飛躍的に向上し,容易に C+N の著しく低い鋼材(高純度鋼という)が量産されるようになり,耐食性の優れた高純度フェライト系ステンレス鋼の開発が盛んになってきた $^{(10)}$. フェライト系ステンレス鋼の耐食性は主に Cr 量と Mo 量で決まるが,Ni 添加は機械的性質とくに靭性の改善に有効であるとされる.しかし,2%以上の Ni 添加は耐 SCC 性を低下させるので,Cr, Mo, Ni のバランスのよい組成の検討がなされている.

3.5 ま と め

種々の形態の不均一腐食について、その特徴と対処法について解説した。実環境で腐食が問題となるのは、アノードとカソードが分離して、アノードに腐食が集中する場合である。鉄は、酸化性の強アルカリ性環境で不動態化する、という特徴を持ち、通気差腐食では溶存酸素還元反応に伴うpH上昇($pH>9.5\sim10$)、またいわゆるマクロセル腐食ではコンクリートの高pHによってその部分の鉄が不動態化する。そのため、不動態化した箇所がカソードとなり、それ以外の箇所(中性~弱アルカリ性)がアノードになることで、アノー

ド/カソード分離が達成される.これは、構造体が連続していて、電気的導通があるために生じる.そのため、それぞれが絶縁されている小型試験片を設置するだけだと、腐食機構の解釈(通気差腐食やマクロセル腐食と単独腐食)を誤ってしまう可能性があるので注意を要する.

文 献

- (1) 篠原 正:まてりあ、62(2023), 48-54.(第1回講義ノート)
- (2) 篠原 正:まてりあ, 62(2023), 99-105.(第2回講義ノート)
- (3) 腐食防食協会編:腐食防食ハンドブック,丸善,(2000),69-
- (4) 宮坂松甫:腐食防食協会 第68回腐食防食シンポジウム資料, (1986), 10-17.
- (5) 腐食防食協会編:腐食・防食ハンドブック, 丸善, (2000), 171-176.
- (6) 腐食防食協会編:腐食・防食ハンドブック,丸善,(2000),

177-179.

- (7) H. A. Humble: Corrosion, 5(1949), 292–302.
- (8) 梶村治彦: 材料, 60(2011), 862-867.
- (9) 腐食防食協会編:材料環境学入門,丸善,(1993),87-89.
- (10) 細井祐三:材料と環境, 56(2007), 439-446.



篠原 正

1985年 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了 1985年 東京大学工学部金属材料学科 助手,講師

1992年 同学部金属工学科助教授

2002年 物質・材料研究機構材料研究所 ディレク ター,材料信頼性センター グループリー ダー等を経て2015年 同機構定年退職,

2015年 同機構 特別研究員

2020年 同機構 退職,現在に至る.

専門分野:ステンレス鋼の局部腐食,金属材料の大気 腐食

◎40年以上にわたり、金属材料の腐食・防食の研究 に従事・腐食問題の解決にあたるとともに、腐食 研究の重要性を積極的に発信。

BURDEUPE, ZO-WI

改訂 金属物理学序論

幸田成康(著) コロナ社 1973年

東北大学大学院工学研究科 井田駿太郎





図1 本書の表紙カバーと筆者の本棚の中の金属物理学序論.

金属物理学序論はまさに筆者の"思い出の教科書"である. 分からないことや疑問があるとまず金属物理学序論を手にする.図1に本書の表紙カバーと表紙カバーをとった筆者の金属物理学序論の写真を示す.本書の表紙カバーは白色で明るいが、カバーを取ると重厚感のある黒色となっている."思い出の教科書"の執筆にあたり、改めて筆者の金属物理学序論を眺めたが、筆者が所有している教科書の中で最も使い込まれており、書き込みも多かった。表紙が取れそうになってきており、何度も読んだと思う反面、中身を十分理解したかと聞かれるとそうではなく、まだまだ勉強しなければいけないと感じている。今後も大切に使うつもりである.

本書との出会いは、大学学部4年生の時に研究室に所属した直後であったと記憶している.配属した研究室では、金属物理学序論は金属学を幅広く網羅しているので、これが理解できれば大学院試験に余裕をもって合格できる上に今後の研究にも大いに役に立つ、と言われていた.そこで、早速買って勉強したのだが、当時はさっぱり内容が入ってこなかった.結局、本書で勉強するよりも授業の復習や過去問を解いていた.結果的に大学院入学試験に合格できたが、試験で得た知識を研究に生かすことは十分にはできなかった.その後、研究を進めていく中でわからないことの多くが本書に書いてあることがわかり、大学院試験の勉強をしている時にもっと本書を読んでおけばよかったと感じるとともに、上述の言葉の意味がわかった思い出がある.

本書の正確なタイトルは"一構造欠陥を主にした一改訂金属物理学序論"である。著者の幸田成康先生は、金属物理学とは金属に見られるいろいろなマクロな(巨視的)性質や現象を、その構成要素であるミクロなもの、たとえば原子、電子等の挙動から説明しようとする学問であり、本書では主として構造欠陥に関係の深い諸性質を取り上げた、と述べられている。これを頭に入れると本書の全体像が見えてくると筆者は感じている。本書の第1-4章は原子の構造や結晶学、結晶構造といったミクロなものを取り上げている。第5章は"点欠陥、特に空孔"というタイトルでまさに構造欠陥が述べられている。第6章以降では、構造欠陥に関連するいろいろなマクロな(巨視的)性質や現象について述べられている。すなわち、拡散、塑性変形、転位、結晶粒界である。金属学を学ぶ上で構造欠陥を介した現象の理解は不可欠であるが、その理論のエッセンスが本書にはある。

また、本書には理論だけではなく、先人の優れた実験結果 が数多く掲載されている。その実験結果だけでなく、実験方 法も非常に勉強になる。例えば第10章結晶粒界の粒界エネルギーの項では、粒界エネルギーの理論がまず述べられている。さらに粒界エネルギーを求めるための実験方法の詳細も述べられている。本書で紹介されている実験では、特定の結晶方位を持つ3つの粒を十分焼きなまし、各粒界のなす角から粒界エネルギーを求めている。このように知識や理論をどう知恵として研究に活かすか、まで示してくれており、それが本書で学ぶべき重要な点の一つと筆者は考えている。また、このような緻密な実験の上に教科書に載るような知見が生まれると実感できる。

本書の改訂は1973年に行われており、改訂版を本記事で紹介した。初版は1964年に発行されている。改訂前は強度、破壊、状態図に関する章もある。一方で、転位については改訂版の方が詳しく述べられている。

本書には先人たちの科学に対する考え方も書かれている.一例を図2に示す.このような挿絵が各章の先頭などに掲載されている.勉強の合間にふと読んでみると非常に趣深いことが書かれている.また,その時々で捉え方が違ってきており,自身の変化にも気づくことができる.このように本書は金属学を学べるだけでなく,その活かし方や科学とは何かといった根本的なことを考えるヒントにもなる.

筆者は本書を手に取るたびに、教科書に載るような金属学の発展に資する研究成果を上げるためにはどうすればいいかを考えさせられる。筆者にとっては、そういった普段考えないことにも思いを馳せる教科書でもある。

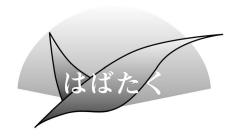
(2023年1月6日受理)「doi:10.2320/materia.62.194]

第 1 章

原子の構造

自然界の不思議さは原始人類にとっても,二十世紀の科学者にとっても同じ位に不思議である。その不思議を昔我等の先祖が化物へ帰納したのを,今の科学者は分子原子電子へ持って行くだけの事である。・・・・・ 化物がないと思うのは却って本当の迷信である。宇宙は永久に怪異に充ちている。あらゆる科学の書物は百鬼夜行絵巻物である。それを繙いて其の怪異に戦慄する心持ちがなくなれば,もう科学は死んでしまうのである。 寺田 寅彦

図2 本書に登場する先人の言葉の一例.



コロナ禍で過ごした博士課程

兵庫県立大学博士後期課程3年生 **辻 流輝**

1. はじめに

私は現在、兵庫県立大学、材料・放射光工学専攻の博士後期課程三年生です。今年度(2023年3月)で課程を修了し、9年間を過ごした学舎を後にし、新天地の京都大学で新たな研究生活をスタートさせます。私の専門は水電解(1)(2)や太陽電池(3)(4)などのエネルギーデバイスとその周辺材料です。本誌への寄稿の機会をいただきましたので、コロナ禍の中で過ごした研究生活を振り返りながら、私の研究について紹介します。

2. 炭素ベースのペロブスカイト太陽電池

私の最近の研究テーマである炭素ベースのペロブスカイト 太陽電池について紹介します. ペロブスカイト太陽電池 (PSC)は、光エネルギーを電気に変換するペロブスカイト結 晶を使った太陽電池です。2009年に桐蔭横浜大学の宮坂力教 授によって発明され、著しい研究開発によりシリコン太陽電 池に匹敵する高い光電変換効率を達成しています. また, 印 刷・塗布プロセスによる低価格化や、プラスチック基板を用 いることでフレキシブル化・軽量化も可能なため、次世代太 陽電池として注目されています. しかし, 使用される金属電 極や有機材料が高価で安定性が低いといった課題がありま す. そこで私は、これらの高価で不安定な電極材料を炭素に 置き換えた炭素ベースのペロブスカイト太陽電池(C-PSC)に 注目し、研究開発を進めています(図1). 炭素電極(グラファ イト-カーボンブラック混合電極)は不活性で、周囲の水分や 酸素を効果的にブロックするため、金属電極を用いるものと 比較して非常に高い安定性を示します. しかし, 光電変換効 率が低いことが課題でした. そこで私は C-PSC の各電極や 光吸収材料の研開開発を行い、太陽電池の高性能化を目指し ました. さらに、分析手法の開拓や性能向上メカニズムの解 明など、C-PSC に関する研究を網羅的に行なっています.

3. コロナ禍での研究開発

私が戦略的国際共同研究プログラム(SICORP)のもと C-PSC の研究をスタートさせたのは2019年でした。研究開始



図1 開発した炭素ベースのペロブスカイト太陽電池(C-PSC)モジュールを持つ著者. (オンラインカラー)

当初、再現実験すら上手くいかず、このままでは埒が明かな いということで、先駆的に研究を進めていたドイツ、フラウ ンホーファー研究所に単身、研究留学に赴き、指導を仰ぎま した. 2019年秋,新型コロナウイルス流行直前のことでし た. 帰国後, 学んだことを着実にアウトプットし, ようやく 研究を軌道に乗せることができ始めた矢先、パンデミックに よる緊急事態宣言の発令により、実験的研究は完全にストッ プしてしまいました. もともと考えるより先に手を動かすタ イプでしたので、実験の中断は大変困りました. しかし、こ れは良いチャンスだと考え、C-PSCの既報論文を100報ほ どかき集め、自宅でこれを読むことにしました. その結果、 C-PSC の現状と課題を把握することができ、自身の研究計 画を明確にすることができました. 今となっては、当時の文 献調査の経験が研究生活の中で役立っています. また, 予定 していた研究留学(スイス連邦工科大学ローザンヌ校へ)は中 止となり、学会の講演大会も全てオンラインとなりました. 慣れない会議ソフトを使用しながら情報収集を行う点に苦労 はありましたが、普段なら聞かないであろう他分野の講演に も簡単にアクセスできるため、この機会にと思い聞いてみる と, 新しい知見を得ることもできました. 厳しい状況でも臨 機応変に対応する能力を, コロナ禍で得ることができたと思 います. この場をお借りしまして, 私の研究生活に関わって 頂きました全ての方に深く感謝いたします. 最後にこのよう な執筆の機会を頂きました日本金属学会に深く御礼申し上げ ます.

文 献

- (1) R. Tsuji, H. Masutani, Y. Haruyama, M. Niibe, S. Suzuki, S. Honda, Y. Matsuo, A. Heya, N. Matsuo and S. Ito: ACS Sustainable Chem. & Eng., 7 (2019), 5681–5689.
- (2) R. Tsuji, Y. Koshino, H. Masutani, Y. Haruyama, M. Niibe, S. Suzuki, S. Nakashima, H. Fujisawa and S. Ito: ACS Omega, 5 (2020), 5090–6099.
- (3) R. Tsuji, D. Bogachuk, B. Luo, D. Martineau, E. Kobayashi, R. Funayama, S. Mastroianni, A. Hinsch and S. Ito: Electrochemistry, 88 (2020), 418–422.
- (4) R. Tsuji, D. Bogachuk, D. Martineau, L. Wagner, E. Kobayashi, R. Funayama, Y. Matsuo, S. Mastroianni, A. Hinsch and S. Ito: Photonics, 7 (2020), 133.

(2022年12月12日受理) [doi:10.2320/materia.62.195] (〒671-2280 姫路市書写2167)

会 記事 本

슾	告	2023年春期講演大会ご案内ならびに参加申込みについて…196
		2023年春期講演大会学生キャリアサポートセミナー/
		ランチョンセミナー/付設展示会開催198
		第13回男女共同参画ランチョンミーティング開催199
		2023年秋期講演大会外国人特別講演および招待講演募集 …199
		第69回日本金属学会賞候補者推薦依頼200
		第18回 JIM/TMS Young Leader International Scholar
		Award 募集案内 · · · · · · 200
		日本金属学会主催国際会議企画提案募集201
		第4回日本金属学会フロンティア研究助成募集202
		2024年度金属学会シンポジウムのテーマ募集203
		金属学会シンポジウム開催報告204
		2023年度新設「研究会」発足のお知らせ205
		2023年度新設「若手研究グループ」発足のお知らせ205
		2023年度日本金属学会オンライン教育講座開催予定206
掲示板	• • •	······207 会誌·欧文誌 3 号目次 ······210
日本金属	属学	会オンライン教育講座…208 次号予告210
研究集	会	209 新入会員211
支部行	事	209 行事カレンダー212

事務局 涉外·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

- 出版案内,投稿規程,入会申込等はホームページをご利用下さい.
- 支部行事, 掲示板, 研究集会等の情報はホームページにも掲載しております.

슺 告(ホームページもご参照下さい)

2023年春期(第172回)講演大会ご案内および参加申込みについて

2023年春期講演大会は、3月7日(火)は東京都立産業貿易センター「浜松町館」、8日(水)から10日(金)までは東京大学駒 場 I キャンパスにて開催致します. (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3月7日(火)は東京都立産業貿易センター「浜松町館」、3月15日(水)はオンライ ンにて開催致します. (希望により発表日が異なります.)

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、下記参加申込要領をご覧下さい。

日	程
---	---

日 時	行事
3月7日(火)	(東京都立産業貿易センター浜松町館2階)
14:30~18:00	ポスターセッション
3月8日(水)	(東京大学駒場 I キャンパス)
9:00~ 9:40	贈呈式
$9:50{\sim}10:40$	学会賞受賞記念講演
$10:50{\sim}11:40$	本多記念講演
13:00~17:00	学術講演
3月9日(木)	(東京大学駒場 I キャンパス)
9:00~17:00	学術講演
3月10日(金)	(東京大学駒場 I キャンパス)
$9:00{\sim}17:00$	学術講演
3月15日(水)	高校生・高専学生ポスターセッション(オンライン)

※懇親会は開催いたしません. ※高校生・高専学生ポスター発表者には、ユース会員の資格を付与します.

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

(後期(当日)申込)2023年2月23日~3月15日

https://www.jim.or.jp/convention/2023spring_after/

◆大会参加費(講演概要ダウンロード権含む)※年会費とは異なります.

参加費・懇親会の消費税扱については、ホームページ(一覧表 PDF)をご参照下さい.

会 員 資 格	後期(当日)申込 (2 月23日〜3 月15日) クレジット決済のみ
正員・維持員会社社員,シンポジウム共催・協賛の学協会会員・鉄鋼協会会員 (本会非会員)	13,000円
2023年3月1日時点で65歳以上の個人会員*, ユース会員	無料
学生員**	7,000円
非会員*** 一般	27,000円
非会員*** 学生(大学院生含む)	16,000円

- お支払後の取消は、準備の都合上ご返金いたしかねますのでご了承下さい.
- 領収書は,決済完了後に申込画面(講演大会 Mypage)からダウンロードし,印刷して下さい.
- 参加方法や講演概要ダウンロードについては、下記をご参照下さい.
- * 65歳以上の個人会員 : 会員情報に生年月日のご登録がない場合は、課金されますのでご注意下さい. 会員情報に生年月日をご登録されていない方は、大会参加申込みの前に annualm@jimm.jp まで会員番号・お名前・ご連絡先・生年月日をお知らせ下さい.
- ** 学生員: 卒業予定変更等により会員種別に相違がある場合,事前に**会員種別の変更手続きを行ってから**,大会参加をお申込下さい.会員情報に登録された卒業年次を超えると,自動で正員となっています.
- *** 非会員の参加申込者には、1年間の会員資格を付与します. ただし特典は重複して付与いたしません.

◆支払方法

後期(当日)申込はクレジット決済のみとさせて頂きます.

◆参加方法

(事前参加申込みの方)参加申込みをされ、参加費を納入された方へは、概要公開日に講演概要閲覧等に必要な参加者個別認証 ID とパスワードを配信いたします.

(後期(当日)申込の方)参加申込受理通知に記載の「登録番号」および「パスワード」が講演概要閲覧に必要な個別認証 ID とパスワードになります.

◆講演概要の WEB 公開

講演概要の公開日は、大会2週間前の2023年2月21日(火)です。特許関係のお手続きは、公開日までにお済ませ下さい。 講演大会公開サイトにログイン後、講演概要の閲覧ができます。

◆参加証

大会マイページにて「参加証」を印刷し、来場の際提示下さい.

◆講演概要集購入について

講演概要集 DVD は作成いたしません. 全講演概要は、本大会 Web サイトで公開をします. これまで概要集 DVD のみ購入をされていた方も、通常の参加登録をして頂き、概要の閲覧をお願いします.

参加申込·問合先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会

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

春期講演大会にて、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 <u>2023年3月8日(水) 12:10~</u> (時間は、多少前後する場合がございます)

会 場 東京大学・駒場 I キャンパス 金属学会講演会場

参加 費 無料 昼食を無料提供いたします.

参加方法 3月7日(火)13:00頃より参加券を「学生ポスターセッション会場(浜松町)」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.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.

参加企業:

A 会場 (1 号館 1 階)

12:10~12:30 東邦チタニウム㈱

「会社概要説明会~私たちの暮らしに広がる"チタン"|

12:35~12:55 石福金属興業㈱

「小さな貴金属で大きな未来を拓く. 適性が 活かせる仕事を一緒に見つけませんか?」

13:00~13:20 梯豊田中央研究所

「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〜 |

C 会場 (1 号館 2 階)

12:10~12:30 ㈱プロテリアル(旧:日立金属)

「会社説明会 ~モビリティ, インフラ関連でトップシェア製品多数! 100年以上の歴史を誇る高機能材料メーカー~|

12:35~12:55 大和工業㈱

「会社概要説明~鉄で未来を 未来の鉄を~」

13:00~13:20 ㈱神戸製鋼所

「製鋼所」だけど鉄だけじゃない! ~神戸製鋼所・素材事業のご紹介~

ランチョンセミナー開催のお知らせ

春期講演大会にて、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 2023年3月9日(木),10日(金) 12:10~12:50

会 場 東京大学・駒場 [キャンパス(金属学会講演会場)

参加費 無料 昼食を無料提供いたします.

参加方法 3月8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. 予めご了承下さい.

参加企業

 $3/9(\star)$ 12:10~12:50

○オックスフォード・インストゥルメンツ㈱

C 会場(1 号館 2 階)

「In-situ 加熱実験に対応した EDS/EBSD 分析システム」 ※動画版技術セミナーは大会ホームページよりご覧下さい.

○㈱TSL ソリューションズ E 会場(11号館1階)

「EBSD パターンの新たな指数付け法を中心とした OIM-A9 の紹介」(代表取締役 鈴木清一)

○ヴァーダー・サイエンティフィック㈱

I 会場(12号館 2 階)

「大きなサンプルの作製に役立つ装置の紹介」(長沢浩樹)

3/10(2) 12:10~12:50

○㈱島津製作所: E 会場(11号館1階)

「超音波光干渉イメージングによる表層欠陥の非破壊検査装置 MIV-Xのご紹介」

○ブルカージャパン㈱: G 会場(11号館 2 階)

「ここまで来た! ナノインデンター評価技術! ~環境制御・ハイスループット・in-situ 微小力学評価~|

(ナノ表面計測事業部アプリケーション部 二軒谷 亮)

付設展示会開催のお知らせ

春期講演大会にて、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いたします.

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)、コーヒー無料サービスも実施する予定です。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 2023年3月8日(水)~10日(金) 9:00~17:00

(10日は14:00まで)

展示会場 1号館1階

出展企業(1/末現在)

- ○アドバンスソフト㈱
- ○㈱アントンパール・ジャパン
- ○茨城県中性子ビームライン
- ○オックスフォード・インストゥルメンツ㈱
- ○㈱サーモ理工
- ○㈱島津製作所
- ○㈱TSL ソリューションズ
- ○東芝ナノアナリシス㈱
- ○日本テクノプラス㈱
- ○ヴァーダー・サイエンティフィック㈱
- ○ブルカージャパン㈱
- ○㈱山本科学工具研究社
- ○㈱UNICO

他

第13回男女共同参画ランチョンミーティング開催のご案内 「金属材料分野での多様なキャリアパス」



金属材料分野でのキャリアパスとしてどのようなものがあるでしょうか.企業,大学,独法研究機関など様々です.また,一言で企業といっても様々な分野で活躍可能です.金属材料を学んだ先輩達がどのような進路で活躍しているか話を聞いてみませんか.

今回は、吉田周平先生(京都大学)にご講演を依頼しました. 皆様のご参加お待ちしております.

主 催 男女共同参画委員会日本金属学会·日本鉄鋼協会

協賛予定 男女共同参画学協会連絡会

日 時 2023年3月10日(金)12:00~13:00

会場 東京大学駒場 I キャンパス※1 号館 2 階157(鉄鋼協会会場)

参加費 無料 弁当30人分まで無料提供.

申 込 直接会場にお越し下さい.

(講演大会参加申込の有無にかかわらず, このミーティングに参加できます!!)

2023年秋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年秋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。

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)

• その他: 大会参加費免除, 懇親会招待

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

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.

推薦書提出期日 2023年5月6日(土)

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

8 022-223-3685

E-mail: stevent@jimm.jp

第69回日本金属学会賞 候補者推薦依頼

第69回日本金属学会賞の候補者の推薦を下記要領にて募集いたします。ご推薦をお願いいたします。

第69回学会賞推薦要領

主 旨 金属およびその関連材料の学術および科学技術の振興に顕著な貢献をした者に授賞するものです.

推薦資格 本会代議員

審査基準 この賞の審査基準は、下記の通り

- (1)当該分野を切り開く先導的な役割を果たしたか
- (2)学術上重要な発見をしたか
- (3)効果が大きい重要な発明をしたか
- (4)学術や技術の進歩に大きく貢献したか
- (5)金属およびその周辺材料の科学技術の振興に貢献したか
- (6)研究や開発ならびに育成や啓発によって社会へ貢献したか
- (7)金属学会の活動に貢献したか

推薦方法 下記 Web フォームよりご推薦下さい.

推薦書類提出締切 2023年5月8日(月)

留意事項

- 本賞の受賞者は、同じ年度の増本量賞、谷川・ハリス賞を受賞することはできません。
- 2021年 · 2022年度代議員の方は2023年 4 月21日までにご推薦下さい.

推薦書提出先 https://data.jim.or.jp/jim/shou/g/

問合せ先 (公社)日本金属学会 学会賞係

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

8 022-223-3685 **MX** 022-223-6312

E-mail: award@jimm.jp

第18回 JIM/TMS Young Leader International Scholar Award 募集案内

本会では、若手研究者及び技術者の活動の活性化を図り、併せて TMS との国際交流を促進させることを目的に JIM/TMS Young Leader International Scholar Program を設けており、TMS への派遣者を募集いたします.

決定した派遣者は、金属学会の Young Leader International Scholar Award **受賞者**として、2024年 TMS Annual Meeting (2024年 3 月 3 日~3 月 7 日: 米国 Florida 州 Orlando) に派遣し、講演発表するとともに TMS から表彰を受けていただきます。また、大会前後に関連機関の訪問も可能です。

募集要領

応募資格 ①日本金属学会の正会員で派遣時点に満35歳以下であり、本会の活動に熱意を持っている人.

②日本金属学会の機関誌に論文が掲載されたか、または講演発表した経験があり、かつ英語で講演発表ができる人.

③日本金属学会の若手世代の代表として、責任ある行動がとれる人.

派遣人数 若干名(1~2 名)/1 回

応募手続 応募(推薦)申請書(所定の用紙)に記入の上,事務局まで E-mail で送信下さい.

応募書類 応募(推薦)申請書

- ①候補者情報
- ②応募理由(400字程度)
- ③論文および講演発表のリスト:5編程度

国際会議等での口頭発表リスト:5編以内

- ④TMS Annual Meeting で発表予定の講演のタイトルとアブストラクト(英語で400word 程度).
- ⑤研究内容と研究者として今後の抱負(英語で400word 程度).
- ⑥TMS Annual Meeting への参加・発表で期待される成果(英語で300word 程度).
- ⑦米国の大学・研究所・企業などへの訪問計画と目的(先方との事前コンタクトは不要).

本会補助 派遣費用上限30万円. ただし, TMS への派遣に合わせて北米内の大学・研究機関・企業等を訪問する場合は上限 40万円.

応募締切日 2023年5月8日(月)

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「Young Leader」係

☎ 022-223-3685 E-mail: stevent@jimm.jp

200 本会記事

日本金属学会主催国際会議企画提案募集

本会が主催する国際会議の企画提案を募集します. 2024 年度以降開催の国際会議が対象です. 期日までにご提案下さいますようお願いいたします.

提案締切日 2023年5月31日(水)

提案要項 下記事項を記載した提案書(A4版,ホームページよりダウンロードして下さい)を,本会会長宛で申請して下さい.

- (1) 会議の名称(和文名・英文名)
- (2) 会期
- (3) 開催地·会場予定
- (4) 会議の目的・特徴
- (5) 日本開催の経緯と意義
- (6) 計画概要
 - a. 協賛,後援団体
 - b. 主要準備日程
 - c. 使用語
 - d. 参加予定国(国名·国数)
 - e. 参加予定者数(国内外)
 - f. 著名な国内外参加予定者(氏名・所属・役職)
 - g. パラレルセッション数およびポスターセッションの 有無
 - h. プロシーディングスの出版(出版元・予定頁数,製作部数・頒価・配布方法)
 - i. 予算(収入·支出明細)
- (7) 準備委員会委員(氏名·所属·役職)
- (8) 提案(連絡)責任者(氏名·所属·役職·住所·電話· E-mail)

提案書送付先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32 (公社)日本金属学会 国際会議募集係 E-mail: stevent@jimm.jp

--公益社団法人日本金属学会主催国際会議開催の実施方針--

1. 基本的要件

- (1) 日本での開催の要望が国内外にあり、かつ本会会員からも要望されていること.
- (2) 関係国内学脇会の後援を得られること.
- (3) 会議の構成,主要題目,発表予想件数,日程,使用語,参加予定者数,参加予定国,予算規模,会議の計画内容が本会が主催の会議としてふさわしいと認められること.
- (4) 本会主催の会議としてふさわしい会議計画の内容とは 原則として次のようなものをいう.
 - ①会議の構成,主要題目,日程,使用語が適切である.
 - ②参加国数及び国外参加者が10ケ国50名以上予定されている.
 - ③参加予定国及び参加予定者は確実な根拠に基づいて 推定されている.
 - ④予算規模及び内容は適切なものである.
 - ⑤当該分野における国内外の代表的学者の参加が予定 されている.

(5) 会議の Proceedings を刊行する場合は、多重投稿等ミスコンダクトが生じないよう対策をとること、実施する対策を事前に届け出て本会の承認を得ること.

2. 会議の規模と区分

- (1) JIM 国際シンポジウム(JIMIS) 150名未満
- (2) JIM 国際コンファレンス(JIMIC) 151名以上
- (3) その他の国際会議(国際的要請や国際連携に基づいて 主催する国際集会等)

3. 開催頻度

必要に応じ随時開催する.

4. テーマの選定方法

調査研究推進委員会で審議,優先順位をつけて選定する. 選定したテーマを国際学術交流委員会に提案,同委員会で審議,開催テーマ,会議の区分等を決定して,理事会に答申, 開催テーマ,会議の区分等が正式に決定する.

5. 財源及び経費

- (1) 財源
 - ①参加費
 - ②国庫補助金
 - ③地方公共団体補助金
 - ④民間財団補助金
 - ⑤本会国際会議開催準備資金および国際学術交流資金からの補助金(上限350万円)
 - ⑥他学協会補助金
 - ⑦寄付金
- (2) 経費

会議に要する経費は、慣例に従って下記の項目を計上する.

- ①会議準備費
- ②本会議費
- (3) 成果刊行費
 - ①印刷製本費(プロシーディングス製作費)
 - ②編集費(論文校閲料,アルバイト料,その他)
 - ③通信運搬費(プロシーディングス発送料,発送用資材等)
- (4) 予備費

6. 会議のブロシーディングス出版

JIMIS, JIMIC についは、統一したスタイルにより、当該会議の予算により本会でプロシーディングスを作成することを原則とする.

7. 業務処理

本会の「国際会議開催準備マニュアル」を参考にして当該会議組織委員会(実行委員会)で処理する.本部事務局では組織委員会(実行委員会)の指示に従って業務の一部を処理する.

8. 会計処理

本会が主催する国際会議の会計処理は、本会からの補助金の有無にかかわらず、公益法人会計基準、本会定款・細則及び会計処理規程並びに国際会議開催会計処理マニュアルに準拠して、適切な処理をすることを原則とする.

9. 国際学術交流資金からの補助金

補助金は、原則として一事業につき上限を350万円とする。ただし、1年間に複数の事業(国際会議)を行う場合は、一年あたり500万円を上限とする。

補助金の残余は会議終了後に全額を返却する.

第4回日本金属学会フロンティア研究助成募集

教育・研究機関での金属及びその関連材料分野の学術研究及び技術研究の発展や若手研究者の育成や奨励を主な目的として,金属及びその関連材料分野に関連する材料又はプロセスに関する研究に助成金を交付しますので,助成の対象となる研究を募集いたしますので,応募下さい.

募集期間:2023年3月1日(水)~4月30日(日)まで

募集要項

1. 応募資格

応募者(代表者)は、2023年4月1日時点で45歳以下の日本の教育機関または公的研究機関に所属し、日本国内で研究に従事する者(学生・大学院生および企業との兼務者を除く)であること、ただし、共同研究者は国外でも可とする

応募は一人一件とします. 同一研究室からの複数応募は可能ですが, 新規採択は1件とする.

活動開始時には、非会員は会員になることが望ましい. 過去に助成を受けた方も、研究期間が終了していれば応募 可能

過去に採択されなかったテーマで再応募する場合は新たに 申請書を提出する.

2. 助成の対象となる研究

金属及びその関連材料分野に関連する材料又はプロセスに 関する調査,試験,研究及び開発とする.

- 3. 研究期間:助成研究の実施期間は,原則2年間とする.研究開始日が年度途中となる場合は,年度をまたいだ2年間とする.
- 4. 助成件数:年間10件以下
- 5. 助成金額:1件あたり,150万円以下

6. 助成金の使途

研究等に直接必要な費用及び所属組織の必要最低限の間接 経費(ただし、直接経費の10%を上限とする)に充当する こと、研究者の人件費(臨時雇用の研究補助者等の費用を 除く)には充当できないものとする.

7. 助成金の交付方法および交付期間

研究助成金の交付方法は、原則として、助成実施者が所属 する組織に対する奨学寄付の形とする. 共同研究者が別の 組織に所属する場合は、複数の組織に交付することは可能 です.

研究実施者は、速やかに助成金受領のために助成金交付の 手続き(奨学寄附受付窓口の連絡等)を行うこと.

8. 応募方法

(1)提出書類:所定様式の「研究助成金申請書」に必要事項を 記入し、申込専用サイト(提出方法参照)からア ップロードし提出する。申請書の様式は、本会 のホームページからダウンロードできます。

必要事項: 応募者, 研究題名, 研究分担者(共同研究者がある場合), 予算(費目,金額), 研究目的(背景, 必要性,意義,価値,成果活用の見込み等), 研究計画(実施計画,成果目標等),報告予定,該当する分科,研究業績,金属学会での活動実績等

(2)作成要領

「研究助成金申請書」に記載された作成要領に従って日本語(専門語等で部分的に外国語を使用することは可)で作成すること、申請書については、作成要領に明記されたペー

ジ数制限(概ね4ページ程度)を遵守すること.制限ページ数を超えた申請は受け付けません.

(3)提出方法

申込専用サイト: https://data.jim.or.jp/jim/fro/tou/ 作成した研究助成金申請書をアップロードし提出して下さ い. なお,ファイルは MS-Word 形式として下さい.

郵送や E-mail, Fax での申請は受け付けません.提出書類等は、採否にかかわらず返却しません.

【遵守事項】

研究助成金の交付を受ける際には、研究実施者(応募者及び共同研究者)は、次の事項を遵守下さい.

- ①助成研究は、あらかじめ本会に提出した助成研究実施計画 に従って実施すること.
- ②助成研究の実施過程において助成研究実施計画を変更する 必要が生じた場合(中止する場合を含む)は速やかに報告 し、重大な変更については本会と対応を協議すること.
- ③助成実施者が所属している組織から別の組織に異動する場合は,本会と対応を協議すること.
- ④研究終了6ヶ月後までに、終了報告書(A4様式1枚)及び成果報告書を日本語(専門語等で部分的に外国語を使用することは可)で作成し、原則としてE-mail 添付にて提出すること. なお、成果報告書は"まてりあ"への成果報告(2頁)の投稿に代えるものとする. なお、成果報告は研究終了からおおむね1年後に"まてりあ"に掲載するものとする.
- ⑤本会から求められた場合は、実施状況を報告すること.また本会が研究施設への訪問を希望した場合は、可能な範囲で対応すること.
- ⑥研究実施者又は研究実施者の所属する組織は、帳簿を備え、助成研究に係わる経理を他の経理と明確に区別し、本会から照会があった場合はこれに応ずること.
- ⑦研究成果は研究開始時から研究完了後1年までの間に本会の講演大会またはセミナー・シンポジウムにおける発表2件,及び本会の欧文誌又は会誌に論文を投稿しなければならない.
- ⑧研究成果を学会・学術論文誌・新聞等に発表する場合は、 事前に本会に連絡するとともに、本会から資金援助を受けたことを明記すること。
- ⑨実施計画に記載した研究を実施しなかった場合,提出期限後1年を経過しても研究成果報告書の提出がない場合又は研究実施者が研究中止の申し出をした場合には、研究助成金の全額又は残額を返還すること.

【留意事項】

1. 機器・設備等の帰属

助成金により取得された機器・設備等は,原則として研究 実施者の所属する組織に帰属します.

202 本会記事

2. 助成研究の成果の帰属

助成研究の成果として得られた特許等の知的財産権は,原 則として研究実施者に帰属します.

3. 助成研究の成果の公表等

成果報告は、この法人の会報及びホームページ上で一般の 閲覧に供します.

4. 申請書記載情報の取り扱い

申請書に記載された研究情報については、審査・選考以外の目的には一切使用しません.

また、個人情報については、本会外へは一切漏洩しません.

- 5. その他留意事項
- ①採否の事由は非公開とし、これに関する問い合わせにはお答えしません.
- ②研究助成金の申請後、何らかの理由により研究を実施できないことが判明した場合、速やかに本会に報告すること.

問合先 (公社)日本金属学会フロンティア研究助成係 E-mail: stevent@jimm.jp **☎** 022-223-3685

2024年度金属学会シンポジウムのテーマ募集

提案期限: 2023年9月1日(金) 厳守

会員の研究活動の一層の活性化を図ることを目的として、春秋大会とは別に個別にシンポジウムを実施しております。この度、広く会員からシンポジウムのテーマを募集することにいたしました。つきましては、2024年度開催のシンポジウムテーマ(講演大会とは別)を募集いたします。下記の募集要領をご参照のうえ、活発な討論が期待できる有益なテーマを積極的にご提案下さい。セミナーシンポジウム委員会で協議のうえ、採否を決定いたします。

シンポジウムの開催趣旨

金属学会シンポジウムは、話題性のあるトピックス等の特定のテーマに関心をもつ研究者が集まって、講演発表、相互討論を行い、問題への共通認識を深め、今後の研究の発展に資することを目的として実施する.

今回募集するシンポジウムの開催時期

2024年度(2024年3月1日~2025年2月28日)内に実施

応募要領

提出書類 提案書を下記提出先に送付して下さい.

(提案書の様式は HP(https://jimm.jp/event/symposium/)よりダウンロードして下さい.)

提案締切 2023年9月1日(金)

応募から実施までの流れ

募集締め切り(9月)⇒セミナーシンポジウム委員会にて採択決定(10月頃)⇒事務局から採択通知と具体的実施準備の連絡⇒講師・プログラム・会場の決定(開催6か月前に確定必要)・会告⇒講師依頼⇒テキスト作成(開催2か月前に原稿必要)⇒参加者募集⇒開催

〈世話人〉

- 1. 講演者への内諾(内諾後,事務局から正式依頼いたします.)
- 2. プログラム日程案作成・会場手配(事務局と相談)
- 3. 開催当日の司会・進行

〈講師〉

事前の予稿集原稿(4 頁程度)執筆と予稿

〈事務局〉

- 1. 費用支払い(会場費, 旅費謝礼, 昼食費等)
- 2. 予稿集編集·印刷
- 3. 講師依賴状配信
- 4. 関係学協会への協賛依頼

提案書提出先·問合先

下記宛てに E-mail で送付して下さい. 2,3日過ぎても受理の通知が届かない場合はご連絡下さい.

日本金属学会 セミナーシンポジウム委員会宛

金属学会シンポジウム開催報告

タングステン材料科学

(第9分野企画)

開催日 2022年12月8,9日

場 所 仙台国際センター(仙台市)

近年,核融合分野における実験炉ITERの耐熱・耐粒子束機器や,加速器のターゲットや遮蔽材料として,タングステン系の材料が注目されている。タングステンは,これらの高エネルギー分野のみならず,様々な分野での応用可能性を秘めているが,高融点ゆえの材料学的な課題も多い。本シンポジウムでは,タングステン材料科学の展開について,材料開発,評価,計算科学に関連した発表,討論を行い,今後の研究の発展に資することを目的として,2022年12月8,9日に仙台国際センター(仙台市)にて開催された。今回は,オンラインとのハイブリッド対応をせず現地開催のみとしたが,2日間で産学から合計83名が集まり,当該分野に対する高い関心を示した。講演内容は以下の通りであり,各40分の時間を配分した。

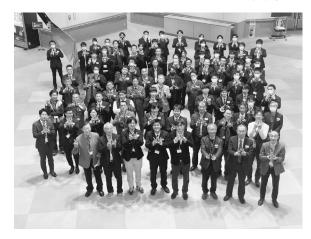
- (1) 核融合炉用タングステン合金の開発(東北大 長谷川晃)
- (2) タングステン表面ナノ構造形成の解明を目指したハイブリッドシミュレーション(核融合研 伊藤篤史)
- (3) タングステン中の水素同位体の蓄積・拡散における照射 効果とその抑制(富山大 波多野雄治)
- (4) 照射下タングステンにおける溶質元素効果のモデリング (原子力機構 鈴土知明)
- (5) 核融合実験炉 ITER のダイバータ用タングステンの開発(量研機構 福田誠)
- (6) 日本のタングステン産業の現状と課題(タングステン・ モリブデン工業会 川口晃)
- (7) タングステン材料のマイクロ・マクロメカニクス(量研機構 兪周炫)
- (8) タングステンにおける照射欠陥挙動の TEM その場観測 (島根大 荒河一渡)
- (9) 粒界強化再結晶ナノ組織タングステン合金の加速器科学への応用(高エネ研 牧村俊助)

大学および国立研究所からの核融合炉や加速器への応用を 見据えた材料開発や、高エネルギー粒子線照射環境特有の現 象の理解に関する基礎研究に関する講演に加えて、産業とし てのタングステン材料の現状についての講演もあり、産学両 者の参加者の興味を引くバランスの取れたプログラムとなっ た.

講演者には質疑の時間を10分程度確保して頂いたが、3年 ぶりの現地開催ということもあってか、活発な意見交換が為 された印象である. タングステンは、鉄鋼の添加元素としての利用が多いのが現状であるが、核融合炉、加速器などの高エネルギー分野に欠かせない材料としての今後の発展がますます期待されるシンポジウムとなった. このように想定以上の盛会であったために、懇親会が開催できなかったことだけが残念であるが、with コロナの時代に真に対応した社会となれば、多角的な学術交流の場としてのシンポジウムが再び開催できるものと確信している.

尚,本シンポジウムは材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」(東北大学金属材料研究所 GIMRT ワークショップ) および日本金属学会「高エネルギー環境用材料評価研究会」(橋本直幸代表世話人)との共催で開催された。また、タングステン・モリブデン工業会、プラズマ・核融合学会、日本原子力学会より協賛頂いた。感謝申し上げる。

(文責:笠田)



「W」のハンドサインで集合写真

(企画世話人代表:東北大 笠田竜太, 北大 橋本直幸)

 \Diamond \Diamond

204 本会記事

2023年度新設「研究会」発足のお知らせ

本年3月から新たに下記の研究会が発足いたします.

メンバーとして登録を希望される方は、氏名、勤務先、連絡 先 (E-mail address 含む)を明記の上、世話人宛にお申込み下さい、研究会の活動期間は 1 期 5 τ 年以内です、継続更新の場合は、延長期間 1 期 3 年以内、最長活動期間は 2 期 8 年以内です。

(研究会新設募集:7号会告予定/申請締切日:9月1日)

■87. 水素が関わる材料科学の課題共有研究会

活動期間 1期5年間(2023年3月~2028年2月)

近年の再生可能エネルギーの普及拡大に並行して、電力との相互変換が容易である水素エネルギーに対する期待は益々高まり、社会導入に向けた研究開発が多方面において進められている。さらに最近では、カーボンリサイクルに関連した諸化学反応に用いられる水素への需要も高まりつつある。水素エネルギーの製造・貯蔵・輸送・供給・利用のプロセスにおいて、各種機能性材料の利用への関心は高く、その研究開発は新規物質の創製から先端的手法による物性評価まで幅広い研究分野に渡って進められている。種々の専門分野を有する研究者それぞれが抱える課題を共有して情報交換および議論を行う場は重要であり、それらの課題解決を図ることで本分野の飛躍的な研究開発の進展が期待される。また、産官学の連携強化の機能も併せ持つことで研究開発成果を社会に活かしていくことができる。以上を鑑みて本研究会を企画する。

代表世話人 浅野耕太

産業技術総合研究所; 主任研究員

a 029–861–4485

E-mail: k.asano@aist.go.jp

■88. 高温構造用材料の水蒸気酸化に関する基礎科学研究会 活動期間 1 期 5 年間(2023年 3 月~2028年 2 月)

カーボンニュートラル(CN)の実現に向けて、耐熱金属材 料を中心とした高温構造用材料の使用環境が多様化してお り、これらの材料で生じる環境劣化を多角的な視点から議論 する必要性が出てている. 将来的に, アンモニアや水素が主 な燃料となり、各種高温エネルギー変換プロセスの CN が実 現する反面, 排ガスの主成分である水蒸気による材料の酸化 (高温水蒸気酸化)が顕著になることが予想される. 金属材料 の高温水蒸気酸化機構については、すでに定性的な説明がな されているものの未だ統一的見解がなく、水蒸気を含む多様 な環境において包括的な議論ができていないのが現状であ る. また、水蒸気酸化により発生する水素が、母材の酸化挙 動や諸特性に与える影響については全く検討されていない. そこで、申請研究会では、高温構造用材料における水蒸気酸 化現象を多角的な視点から議論することで, 現象の解明を目 指すとともに、得られた知見から優れた耐環境特性を有する 高温構造用材料の設計指針を提案する.

代表世話人 上田光敏

東京工業大学;准教授

☎ 03-5734-3311

E-mail: ueda.m.ac@m.titech.ac.jp

2023年度新設「若手研究グループ」発足のお知らせ

若手および調査・研究事業を活性化することを狙いとして,若手主体の研究グループを発足しています.本年3月から新たに下記の研究会が発足いたしました.

■08「原子カエネルギー用材料研究グループ」 活動期間:2023年3月1日~2025年2月28日の2年間 【若手研究グループ設置目的】

照射損傷及び微小試験片技術というエネルギー炉材料特有 の現象を扱う点を共通項とし、将来を担う若手を中心とした 議論の場を設けることにより、産学官のネットワークを形成 することを目的とする.

【背景と必要性, 意義】

第6次のエネルギー基本計画では、2050年カーボンニュートラルに向けた長期展望、それを踏まえた2030年までの政策対応を明示している。この中で原子力エネルギーは、安全性の確保、ならびに、国民からの信頼確保を大前提とし、長期的なエネルギー需給構造の安定化に寄与する重要なベースロード電源に位置付けられており、我々原子力材料研究者には、原子力の安全活用に向けた研究努力が求められている。

しかし、申請者らは、現在の原子力材料研究の方向性、ないしは、研究力の低下に危機感を感じている。原子力材料分野を問わず、近年の若手研究者が減少傾向にあるのに対し、解決を急がなければならない材料問題は常に増加する傾向にある。特に、震災以降、国内の中性子照射場の減少、将来の原子力研究の不透明さが人員的リソースを発散させる方向に作用し、我が国の研究力の低下につながると予測されている。

このように、2011年の震災は原子力材料研究の大きな転換期であったということは明らかであり、これを受け、学術界では、核融合炉や高速炉、小型モジュール炉等の革新炉材料開発に関する研究トピックスにシフトする傾向にある.このため、既設炉を対象とした研究取組に対し、若手研究者の研究参画も減少する傾向にあって、これまでに脈々と培われた材料照射研究のテクノロジーや基礎知見の陳腐化が問題となる.革新炉及び既設炉を問わず、いずれの炉型においても材料に求められる性能は、照射損傷、すなわち中性子照射による原子弾き出しを起源とする材料特性劣化に対する抵抗性の評価であって、これらの研究トピックス間での問題認識の共有化、さらには、双方的議論が享受されるべきであるが、昨今の学会等の研究発表の場において、これらが必ずしも満足されている状況にないと考えている.

このように、学術界と産業界での垣根を外し、共通の研究課題の精緻化、今後の原子力材料研究のあり方、重畳的な発展等について議論するためのプラットフォームを構築することは、今後の継続的な学問体系の発展に対して意義深く、その中でも、今後の原子力材料の研究指針を見定めていくうえでは、若手の階層において産学官の連携がとれていることが新たな研究課題を抽出するうえで強みとなると期待される.

【得られる成果・目標】

まず、本研究会では、震災以降、精力的に進められてきた 模擬照射手法(イオン照射)を活用した微小試験片技術を今後 どのように発展させ、学術界と産業界での双方向的な発展に 必要不可欠な研究トピックスの洗い出しを行い、今後10年間の研究の方向性を見出すべく、議論を深める.これにより、基礎研究知見の向上のみならず、更なる若手研究者の育成も期待される.また、本年から2030年は2050カーボンニュートラルまでの橋渡し期間に位置付けられているが、カーボンニュートラルを本当に達成するためには学術的な飛躍が必要である.そのため、原子力材料コミュニティーに留まらず、今後の研究を担う世代を中心とした研究者ネットワークを構築し、各所属組織の事情に縛られない自由闊達な議論を通じて、新たな学理の追求に向けた指針を得ることを目標とする.なお、本研究会での交流をもとに、科学研究費補助金等の競争的資金に応募することや新しい共同研究展開へも期待される.

代表者 岡 弘(北海道大学大学院工学研究院)

8 011-706-6769

E-mail: hiroshi_oka@eng.hokudai.ac.jp

■09「非鉄金属材料の水素侵入·水素脆化研究グループ」 活動期間:2023年3月1日~2025年2月28日の2年間 【設立の背景,必要性,目的,意義,得られる成果・目標等】

Al 合金や Mg 合金をはじめとした軽金属からなる非鉄金 属材料は、鉄鋼材料と比較して軽量でありリサイクルコスト およびリサイクル時のCO2排出量が極端に低いため、国内 外を問わず今後の利用の増加が期待されている.一方で、例 えば高強度 AI 合金に分類される7000系 AI 合金において応 力腐食割れの原因が材料内に侵入した水素であることや Mg 合金でも水素が脆化の原因となる研究結果が報告されてお り、非鉄金属材料においても水素侵入および水素脆化は憂慮 すべき劣化現象の一つである. これまで、国内外を問わず水 素侵入・水素脆化に関する研究は鉄鋼材料をターゲットとし て行われてきた. しかし, 非鉄金属材料の使用量増加を受 け、今後、今以上に非鉄金属材料の水素侵入・水素脆化に関 する研究の重要性が高まると考えられる. 鉄鋼材料と非鉄金 属材料では水素侵入に影響を及ぼす腐食挙動や水素脆化に影 響を及ぼす力学特性・金属組織など異なる点が多い. これは すなわち, 従来の鉄鋼材料に対する水素侵入・水素脆化研究 のアプローチのみでは不十分であることを示している. そこ で非鉄金属材料の水素侵入・水素脆化に関しての議論および 今後この分野を牽引するであろう30代を中心とした若手研 究者の人材育成、交流を目的とする研究委員会の設立を申請 する.

本委員会で議論の対象とする材料は今後の使用量拡大が期待され水素脆化による劣化が懸念される Al 合金および Mg 合金を中心とした非鉄金属材料である。これらの材料を主として研究する大学・研究所・企業の若手研究者を委員として迎えた。中には水素侵入・水素脆化を専門としない者も含まれるが、いずれも本テーマに大きな興味を持ち、意欲的に知識を吸収しようとする者たちである。また、水素侵入・水素脆化は腐食や応力、材料組織など複数の因子が複雑に影響しあうことで発現するため、分野の垣根を超えた多面的な視野からの研究が必要となる。異分野に属する若手研究者が交流・議論することで、金属学会の若手研究者の知識の底上げおよび超分野的な共同研究の推進が可能になると期待される。

代表世話人 土井康太郎

物質・材料研究機構構造材料研究拠点 耐食材料グループ

3 029-859-2159

E-mail: DOI.Kotaro@nims.go.jp

2023年度日本金属学会オンライン教育講座開催予定

会員向けサービスの向上や,若手や学生の教育・育成を目的とした基礎教育講座を2022年度より完全オンラインで始動いたしました。多くの方のご参加をお待ちしております。尚,順次会告にて募集いたします。

1. 医療用金属材料の基礎(5月11日(木), 12日(金))

講師:阪大特任教授 東北大名誉教授 新家光雄,

東京医科歯科大教授 塙 隆夫コーディネーター:東北大 野村直之

◎詳細本号208頁

2. 弾性異方性の考え方(5月下旬開催予定)

講師:神戸大学教授 田中克志

コーディネーター:

物 · 材機構 上路林太郎, 豊橋技科大 戸高義一

◎多くの力学特性や組織変化の基本的要因の一つである弾性 異方性の基本的な考え方とその利用例を講義する. 結晶構造 の対称性と物性, 巨視的な弾性と微視的な弾性の関係, 弾性 定数の測定方法, 組織形成と弾性異方性について基礎から解 説を行います.

3. 金属材料の耐環境性(2);高温酸化·高温腐食の基礎—熱 力学・速度論・高温強度— (6月6日(火),7日(水))

講師:北大名誉教授 黒川一哉,荏原製作所 野口 学 長岡技科大教授 南口 誠,

東工大准教授 上田光敏

コーディネーター:北大 林 重成,阪大 土谷博昭 ◎耐熱金属材料の使用環境は近年,益々高温化し,金属材料 にとって非常に厳しい環境となるため、材料の高温特性向上 が強く求められています。また高温酸化・腐食の原理原則に 基づき高温酸化・腐食現象を正しく把握して、適切な材料選 定や防食対策に活かすことが要求されます。本講座では、熱 力学,速度論及び高温強度を中心に、高温酸化・腐食の基礎 を学習することで、業務で高温酸化・腐食に携わる研究者・ 技術者として必要な素養を醸成することを目標とします。

4. 工業材料の応力・歪測定(10月26日(木), 27日(金))

講師:東北大学教授 田中俊一郎

コーディネーター:東北大 森戸春彦,

阪大 小泉雄一郎

◎製造工程、形状に起因する残留応力・歪及び集中応力は、物理・化学・機械的特性に大きな影響を与えることが多く、定量的に把握することが求められています。工業製品を構成する材料は、金属、無機・有機材料、半導体、結晶学的にも多結晶・単結晶と多様化し、大きさも極小化する時代となっています。万能な応力・歪測定法はなく、X線・電子線・中性子・放射光・レーザ光・超音波などを用いて個々考案し適用してきました。本講座ではこれらの手法を基礎から解説

し測定事例とともに紹介します. Table-top 型 X 線機器を用いた応力測定は実演も行います.

5. 構造材料(1)鉄鋼材料編(12月7日(木), 8日(金))

講師:早稲田大名誉教授 中江秀雄 金沢大特任教授 潮田浩作 九大鉄鋼リサーチセンター教授 植森龍治 元九大鉄鋼リサーチセンター教授 菊池正夫 コーディネーター:熊大 山崎倫昭

◎鋳鉄および鉄鋼材料は、構造材料として広く用いられており現代社会を土台から支えています。本講座では、鉄鋼材料を新たに使用する、扱うという技術者の皆様を対象に「鋳鉄」、「鉄鋼・薄板」、「鉄鋼・厚板」、「ステンレス鋼」について基礎から解説を行います。

※※掲示/板

集会

◇レアメタル研究会◇

■主 催 レアメタル研究会

■主 宰 者 東京大学生産技術研究所 教授 岡部 徹

■協 力 (一財)生産技術研究奨励会(特別研究会 RC-40)

■共 催 東京大学マテリアル工学セミナー

レアメタルの環境調和型リサイクル技術の開発 研究会

東京大学生産技術研究所 持続型エネルギーイ ンテグレーション研究センター

東京大学生産技術研究所 非鉄金属資源循環工 学寄付研究部門(JX 金属寄付ユニット)

■協 **賛** (一社)軽金属学会,(一社)資源・素材学会, (一社)新金属協会,(公社)日本化学会,(公社) 日本金属学会,(一社)日本チタン協会,(一社) 日本鉄鋼協会 (五十音順)

■開催会場 東京大学 生産技術研究所 An 棟 2F コンベンションホール 〒153-8505 目黒区駒場 4-6-1 (最寄り駅: 駒場東大前,東北沢,代々木上原)

■参加登録・問合わせ

岡部研 学術専門職員 宮嵜智子(tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp)

令和4年度 レアメタル研究会のご案内 (2023.1.6現在)

■第105回 2023年3月10日(金) 14:00~

An 棟 2F コンベンションホール ネット配信 (Zoom Webinar &

リアル講演会+講演のネット配信(Zoom Webinar & YouTube)のハイブリッド研究会

テーマ:夢とロマン

午後2:00~

講演【敬称略】

レアアース資源の現状と課題:リン鉱石の副成分の有効利用(仮) 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 地圏資源環境研究部門

鉱物資源研究グループ 研究グループ長 星野美保子

希土類金属産業が抱える問題点と解決策(仮)

東京大学 生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付研究部門

特任教授 岡部 徹

若手研究者からみた素材プロセス研究の夢とロマン(仮)

東京大学 生産技術研究所 助教 上村 源

研究交流会 · 意見交換会 (開催未定)

公 募

◇物質・材料研究機構 若手国際研究センター ICYS リサーチフェロー公募◇

募集人員 ICYS リサーチフェロー 若干名

所 属 若手国際研究センター

専門分野 独自の発想に基づき、NIMSの優れた研究環境のもと独立して様々な材料(量子材料、電池材料、磁性材料、構造材料、データ科学、有機材料、生体材料等)の研究に取り組む若手研究者を募集。国内最高ランクの給与(604万円~)と年間200万円の研究費を支給。NIMS 定年制研究員への応募時の優遇措置あり(概ね5割が採用)。

応募資格 博士学位取得後10年以内, または着任までに取 得見込みの方

着任時期 2023年8月1日~2024年3月1日

任 期 当初3年,その後評価により1年毎更新,最長5年(NIMS内から着任の場合,NIMSでの職歴により異なる).産休・育休あり.

提出書類 様式などの詳細は下記 URL をご参照下さい. https://www.nims.go.jp/icys/recruitment/

応募締切 2023年3月30日(木)必着

問合せ先 物質·材料研究機構 ICYS 採用担当 E-mail: icys-recruit@nims.go.jp



〈公募類記事〉

無料掲載:募集人員、締切日、問合先のみ掲載.

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をして下さい)

E-mail: materia@jimm.jp

~日本金属学会オンライン教育講座 開催案内~

New!!

『医療用金属材料の基礎』

日 時 一日目 2023年5月11日(木)13:00~16:10, 二日目 5月12日(金)13:00~16:10

医療における診断と治療には多くの材料が使用されており、特に金属材料の進歩と治療技術の進歩には密接な関係がある. 本セミナーでは、医療用金属材料の特色と必要性、用途について紹介し、生体環境において要求される金属材料の特性とその評価方法、生体反応と表面の関係について述べる。さらに具体的な医療用金属材料としてのステンレス鋼、コバルトクロム合金、チタン・チタン合金等を紹介し、それぞれの開発の歴史や特徴、生体組織から要求される力学特性とその材料学的な制御法について学ぶ。

講師:大阪大学特任教授 **新家光雄先生**,東京医科歯科大学教授(2023年4月以降 大阪大学大学院工学研究科 特任教授,神戸大学未来医工学研究開発センター 客員教授,東京医科歯科大学 名誉教授) **塙 隆夫先生**

[講師紹介] 新家光雄先生:1978年名古屋大学大学院工学研究科博士課程後期満了,1979年工学博士(名古屋大学),1988年-1999年カーネギーメロン大学客員助教授,1995年豊橋技術科学大学生産システム工学系教授,1998年7月-1998年12月デイトン大学客員教授,米国国防総省ライトパターソン材料研究所外国人研究員,2003年博士(歯学)(愛知学院大学),2005年東北大学金属材料研究所教授,2009年-2012年東北大学学際科学国際高等研究センターセンター長,2009年-2014年東北大学金属材料研究所所長,2010年-現在 天津大学(中国)名誉教授,2014年-2015年日本金属学会会長,2016年-現在 東北大学名誉教授,大阪大学大学院工学研究科特任教授,東北大学(中国)名誉教授,2022年-現在 日本チタン学会会長

塙隆夫先生:1981年北海道大学工学部金属工学科卒業,1981年北海道大学歯学部助手,1989年歯学博士(北海道大学),1986年~1988年 米国ベイラー歯科大学 客員研究員,1993年徳島大学歯学部助教授,1998年博士(工学)(東北大学),1998年科学技術庁金属材料技術研究所生体材料研究チームリーダー,2001年独立行政法人物質・材料研究機構生体材料研究センター副センター長,2003年-2004年 東北大学金属材料研究所 教授(併任),2004年-現在 東京医科歯科大学生体材料工学研究所教授,2009年-2015年東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻教授(併任),2011年-2014年 東京医科歯科大学生体材料工学研究所所長,2015年-2017年東京医科歯科大学副理事(研究担当),2020年-現在 神戸大学未来医工学研究開発センター特命教授,2020年-現在 大阪大学大学院工学研究科招へい教授,2020年-現在 日本学術会議会員

[協賛予定] エネルギー資源学会,応用物理学会,金属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,日本材料学会,日本材料学会,日本磁気学会,日本自動車工業会,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) 2023年4月27日(木)

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

問合先 (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 ☎ 022-223-3685

〈プログラム〉

<u>一日目 5月11日(木)</u>

<u>二日目 5月12日(金)</u>

13:00~14:30 生体材料としての金属材料

13:00~14:30 医療用金属材料の特徴と機能制御(1)

14:30~14:40 —休 憩—

14:30~14:40 —休 憩—

14:40~16:10 生体反応と表面処理

14:40~16:10 医療用金属材料の特徴と機能制御(2)

~皆様のご参加をお待ちしております.~

208 本会記事

研究会 No. 75

キンク研究会

「ミルフィーユ構造物質におけるキンク形成とキンク 強化:これまでの成果と残された課題」

キンク研究会は、近年、長周期積層構造型マグネシウム合金で発見されたキンク変形という特異な変形挙動を題材に、回位などの新たな視点から材料の変形と破壊についての基礎的議論を深めるとともに、キンク変形を利用した高強度構造材料の開発を進め、新しい材料研究領域の構築に展開していくことを目的として2015年度から活動してきました。2023年度は本研究会の活動期間最終年度にあたり、マグネシウム合金をはじめとするミルフィーユ構造物質におけるキンク形成およびキンク強化の理論に関する成果を中心に総括すると共に、今後に残された課題について、下記3名の講師の方々から話題提供をいただき、参加者の皆様とともに議論を深めたいと思います。本研究会にご参加希望の方は、下記要領にて事前申し込み下さい。

日 時 2023年3月29日(水) 13:30~16:30

場 所 Zoom によるオンライン開催(参加申込者へミーティング ID とパスワードを後日連絡)

共 催 軽金属学会「LPSO/MFS 構造材料研究部会」,新 学術 MFS セミナー,高性能 Mg 合金創製加工研究 会,熊本大学 MRC セミナー

プログラム

13:30~13:35 開会挨拶 名大 君塚 肇

13:35~14:15 LPSO 型マグネシウム合金おける塑性変形の特異性とキンク強化(仮)

東工大 藤居俊之

14:15~14:55 キンク形成とキンク強化の幾何学モデル

(仮) 東工大 稲邑朋也

14:55~15:05 休憩

15:05~15:45 微分幾何学を用いたキンク変形解析:現

状と今後の課題(仮)

阪大 垂水竜一

15:45~16:25 総合討論 司会:東工大 藤居俊之 16:25~16:30 閉会挨拶 熊本大 河村能人

参加費 無料(要事前参加申込)

申込方法 <u>3月22日(水)17:00までに</u>,事務局(藤居)宛 ① 氏名,②所属,③E-mail アドレス,④電話番号 を明記し、申込下さい.

申込·問合先 東京工業大学 物質理工学院 藤居俊之 (E-mail: fujii.t.af@m.titech.ac.jp)

支部行事



2023年度春季講演会

[共催] 日本鉄鋼協会九州支部

下記の通り開催いたします. ご参加をお待ちしております.

日 時 <u>2023年4月18日(火) 13:00~17:00</u> オンライン開催

プログラム

13:00~14:00 湯川記念講演会

金属 3D プリンティング(AM)を用いた次世代モノづくり

~組織制御による高機能化とその応用~

日本金属学会会長 大阪大学 教授 中野貴由

14:15~17:00 講演討論会

テーマ:次世代の構造材料創製に向けたプロセス技術

• 自動車用鋼材に関する最近の研究開発動向

日本製鉄フェロー 吉永直樹

- ・地球温暖化ガス排出量低減に向けた新しいチタン製造技術 の開発 東邦チタニウム 顧問 藤井秀樹
- 硬質・軟質積層構造を用いた高強度マグネシウム合金の次世代モノづくり~LPSO/MFSの積層構造制御とキンク強化~

熊本大学教授 先進マグネシウム国際研究センター長 河村能人部材のトータルパフォーマンス向上のためのマルチマテリアル化技術 産業技術総合研究所 研究部門長 堀田裕司

参加費 無料

参加申込先(後日 URL をご連絡いたします)

九州大学 大学院工学研究院 材料工学部門 土山教授 E-mail: tsuchiyama.toshihiro.178@m.kyushu-u.ac.jp

支部行事はホームページにも掲載されております。



日本金属学会誌掲載論文

Vol. 87, No. 3 (2023)

----オーバービュー----

点欠陥集合体を含む面心立方金属の転位チャンネル内 初期転位組織 徳納一成 光原昌寿 萩野将広

——論 文——

Ni/Al積層膜の拡散挙動に及ぼすAl自然酸化膜と加熱 雰囲気の影響 小柴佳子 異 宏平

-----技術論文-----

Ni基単結晶超合金TMS-238の耐酸化性とクリープ強度に及ぼす不純物元素Sbの影響

高田裕治 杉山拓弥 湯山道也 埋橋 淳 大久保忠勝 原田広史 鈴木進補 川岸京子

Materials Transactions 掲載論文

Vol. 64, No. 3 (2023)

---Review----

Trends of Technological Development of Platinum Group Metal Recycling: Solubilization and Physical Concentration Processes

Yu-ki Taninouchi and Toru H. Okabe

—Regular Article——

Materials Physics

Systematic Study on the Role of the Third Zn-Site Element in $Zn_{2-x}Mg_xP_2O_7$ Showing Giant Negative Thermal Expansion

Ryota Kasugai, Yoshifumi Kadowaki, Yasunori Yokoyama, Naoyuki Katayama, Yoshihiko Okamoto and Koshi Takenaka

Microstructure of Materials

Changes of Particle Size and Morphology of Prepared W/Mo Powders during Hydrogen Reduction Process with the Addition of ROH (R=Li, Na, K)

Jun-Ru Liu, He Zhang, Yong Zhang, Guo-Hua Zhang and Kuo-Chih Chou

Mechanics of Materials

Orientation Dependence of Plastic Deformation Behavior and Fracture Energy Absorption Mechanism around Vickers Indentation of Textured Ti_3SiC_2 Sintered Body

Yuji Shirakami, Ken-ichi Ikeda, Seiji Miura, Koji Morita, Tohru S. Suzuki and Yoshio Sakka

Process Parameter Optimization for Particles Reinforced Weld-Bonding Joints of DP780 Dual-Phase Steel Yixin Qin, Jie Liu, Kai Zeng, Baoying Xing and Jiawei Jiang

Thermal Properties of Carbon Nanofiber Sheet for Thermal Interface Materials under High Temperature and Humidity

Jiangling Xiong, Tomoo Kinoshita, Yongbum Choi, Kazuhiro Matsugi, Yuuji Hisazato and Nobuto Fujiwara

Materials Chemistry

Effect of Titanium Dioxide on Aggregation of Reduced Metallic Iron in Molten Slag

Sunglock Lim, Masashi Nakamoto, Kiyoshi Fuji-ta and Toshihiro Tanaka

Materials Processing

Influence of Surface Roughness of Aluminum Alloy Substrate on Tensile Adhesive Strength of Plasma-Sprayed Yttria-Stabilized Zirconia Coatings

Takayuki Kuwashima, Kazuki Noro and Hiroyuki Waki

Effect of Electromagnetic Stirring on Shape of β -Al₉Fe₂Si₂ Intermetallic Compounds Formed During Solidification of Al-Si-Fe Alloys

Keiji Shiga, Yuichiro Murakami and Naoki Omura

Dimensional Changes of Selectively Laser-Melted AlSi10Mg Alloy Induced by Heat Treatment

> Jun Yaokawa, Keiichiro Oh-ishi, Shuxin Dong, Masashi Hara, Takashi Masutani and Haruki Sato

——Current Trends in Research——

Recent Progress in Nanostructured Functional Materials and Their Applications II

Tomoyuki Yamamoto, Masato Yoshiya and Hoang Nam Nhat

まてりあ第62巻 4 号 予告

[金属なんでもランキング] No. 21 酸化物の標準生成ギブス自由エネルギー

[最近の研究] 溶融塩電解によるアルミニウムスクラップのアップサイクル ……東北大 Lu Xin 竹田 修 朱 鴻民 [最近の研究] 高疲労耐久性を有する溶接組立制振ダンパーを実現する Fe-Mn-Cr-Ni-Si 合金の開発

·······物材機構 吉中奎貴 澤口孝宏 高森 晋 江村 聡 中村照美 [講義ノート] 金属腐食の概要と局部腐食 N ―ステンレス鋼の 局部腐食― ……………元 NIMS 篠原 正

—他—

(都合により変更になる場合がございます)

研究機構



ユース会員

河本晴貴 浦学院高等学校 田川凉雅 西山 碧 坂本蒼空 横浜サイエンスフロンティア 冨田晴生 Hope International Academy 林 扶

高等学校附属中学校 Okinawa 横須賀大真 仙台高等専門学校

高野桂汰 木更津工業高等専門学校 双木 洸 渡辺大士

正 員

岡 田 和 歩 国立研究開発法人物質・材料 品 部 慎 治 株式会社安川電機 中 村 優 希 MA アルミニウム株式会社

研究機構 鷹木清介 日本ピストンリング株式会社 富士本博紀 日本製鉄株式会社

柏 倉 俊 介 立命館大学 髙 城 重 宏 JFE スチール株式会社 山 本 宏 美 東洋製罐グループホールディ

小林正行 日鉄テクノロジー株式会社 中里浩二 国立研究開発法人物質・材料 ングス株式会社

佐藤光晴 東北大学 中村剛慶 JFE スチール株式会社

学 生 員

赤嶺章太郎 高知工科大学 - 楠田かおり 熊本大学 - 古家 駿 早稲田大学

 阿 部 良 哉 長岡技術科学大学
 工 藤 慎 也 早稲田大学
 本 田 卓 生 茨城大学

 新 井 太 一 大阪大学
 工 藤 直 人 茨城大学
 益 田 欣 宗 大阪大学

有岡栞太朗 久留米工業高等専門学校 國本 怜遠 茨城大学 松 岡 夏 輝 東京大学

 伊勢崎
 奨
 富山大学
 窪
 田戸仁一朗
 高知工科大学
 選
 関西大学
 水
 野
 型
 也
 名古屋大学

 出戸仁一朗
 高知工科大学
 黒
 野
 高
 東京大学
 宮
 内
 布
 東北大学

 伊藤
 学
 東京大学
 黒柳洋人
 名古屋大学
 宮
 大輔
 近畿大学

 伊藤悠悟
 東北大学
 古賀修平
 大阪大学
 宮田
 澤
 高知工科大学

井上皓介 東京工業大学 齊藤光郁 大阪大学 宮辺智樹 京都大学

 今富大介 東北大学
 櫻井一輝 名古屋大学
 森 陶子 大阪大学

 岩沼宙樹 金沢大学
 四宮悠成 富山大学
 森野琢水 横浜国立大学

 浮田祥哉 富山大学
 新野田 剛 東北大学
 薬師神 成 愛媛大学

 江川浩史 大阪大学
 塚原優希 東北大学
 安田光希 東京大学

及川太暉 茨城大学 鶴田晃弘 北見工業大学 屋久ダイスケ 東京工業大学

 尾崎 滉一 東京工業大学
 中里海斗 金沢大学
 山崎 樹 豊田工業大学

 小野 憲 吾 兵庫県立大学
 長瀬 未都 名古屋工業大学
 山崎 智美 東海大学

東北大学 小野暢久 中村圭伸 大阪大学 山﨑陸渡 茨城大学 掛川直樹 山下竜弥 東北大学 奈良日花里 茨城大学 東京都立大学 樫 山 勇 希 関西大学 楢木奈桜美 東北大学 山 本 若 奈 奈良女子大学

加藤雅基 芝浦工業大学 新美海礼夢 東京工業大学 芦浦憲一郎 高知工科大学

金田久慶 関西大学 長谷川菜花 久留米工業高等専門学校 哲 源 東北大学 亀 野 航 浜沢朋希 早稲田大学 鷲平直人 大阪大学 東北大学 渡辺俊介 木 倉 健 成 富山大学 飛知和純也 千葉工業大学 芝浦工業大学

岸 達郎 京都大学 古川 岳 足利大学 渡 會 亮 太 東京工業大学

外国一般会員

Mingliang Wang 名古屋大学 YU MIAO フジライズ株式会社 WEI KEJIAN 東京大学

外国学生会員

汗

COBBINAH Prince 東京大学 カルベコフ アリムザン 九州大学 任 家 興 東京大学

唐

 JI YEBEEN
 Pukyong National University
 薛
 浩 妍
 京都大学
 HAN YI
 東京大学

 Kim Kibeom
 Pukyong National Univserity
 戴
 碩亨
 北海道大学
 樊
 子 翔
 関西大学

Lee Yongjoon Pukyong National University 張 宇 東北大学 ホームズ ルーベン 東京大学 YE Tianzhou 東京大学 張 字 陽 東北大学 楊 佶 懿 東京工業大学 ZHANG Yan 東京大学 張 シュンセン 関西大学 李 森 東北大学

若 娜 東京工業大学

 Abrar Ahmed 富山大学
 趙 至洋 茨城大学
 LI BOHAN 広島大学

 魏 子棋 東京大学
 唐 龍樹 名古屋大学

子 登 東京大学

行事カレンダー

太字本会主催(ホームページ掲載)

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合先	締切
2023年 3 月 2~3	第15回トライボロジー入門西日本講座(ハイブリ	日本トライボロ	TEL 03-3434-1926 jast@tribology.jp	完昌
	ッド開催)	ジー学会	http://www.tribology.jp/	定員 80名
3	第195回腐食防食シンポジウム「塗覆装の劣化損傷とその評価・解析技術の現状と今後」(東京理科大)	腐食防食協会	TEL03-3815-1161 ysm.hng-113-0033@jcorr.or.jp https://www.jcorr.or.jp/yotei/195.html	
3	文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究 開発プロジェクト 第1回シンポジウム(東北大)	文部科学省 デーマ タ創出・活用開開 テリアル研究ト極限 プロジェクトを極限 環境対応構造材料 研究拠点	https://www.material.tohoku.ac.jp/ \sim uhtm/RISME/symp2023/	
3	第2回計算イオニクス研究会(第83回固体イオニクス研究会)(ファインセラミックスセンター)	日本固体イオニク ス学会	TEL 052-871-3500 kuwabara@jfcc.or.jp	
6	第48回組織検査用試料の作り方(組織の現出)講習会「鉄鋼材料・非鉄金属材料・表面改質処理および異常組織材」(東京)	材料技術教育研究 会	TEL 047-431-7451 jimukyoku@mskoshukai.jp	2.22
7	日本顕微鏡学会第47回関東支部講演会(オンライン)	日本顕微鏡学会関 東支部	http://microscopy.or.jp/kanto2022/ TEL 022-217-5374 y-sato@tohoku.ac.jp	
7~10	日本金属学会春期講演大会(東大駒場 I キャンパス,東京都立産業貿易センター浜松町館)(本号196頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jimm.jp	
8	圧力設備の溶接設計施工テキスト講習会(東京+ オンライン)	日本溶接協会	TEL03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/mt/kenkyu/cp/ archives/2022/12/post_15.html	
8	学生キャリアサポートセミナー(東京大学駒場 I キャンパス) (本号198頁)	日本金属学会·明 報社	TEL 03-3546-1337 http://www.meihosha.co.jp	
8~9	ウィンタースクール「トポロジー最適化の基礎~ 積層造形によるものづくりへの応用~」(東京理 科大)	日本計算工学会	TEL 03–3868–8957 office@jsces.org https://www.jsces.org/	2.24
9~10	ランチョンセミナー(東京大学駒場 I キャンパス) (本号198頁)	日本金属学会·明 報社	TEL 03-3546-1337 http://www.meihosha.co.jp	
10	第105回レアメタル研究会(東大生産技研+オンライン開催)(本号207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/rc40_j.html	
10	第13回男女共同参画ランチョンミーティング 「金属材料分野での多様なキャリアパス」 (東大駒場 I キャンパス)(本号199頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 annualm@jimm.jp	
13~15	2022年度量子ビームサイエンスフェスタ(つくば + オンライン)	高エネルギー加速 器研究機構物質構 造科学研究所,J- PARC センター 他	qbsf2022-office@ml.post.kek.jp https://www2.kek.jp/imss/qbsf/2022/	
14~16	第14回日本複合材料会議(JCCM-14)(早稲田大)	日本材料学会,日 本複合材料学会	TEL 03-5981-6011 jscm@asas.or.jp http://www.jscm.gr.jp/	
15	日本金属学会春期講演大会高校生・高専学生ポス ターセッション(オンライン)(12号914頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 annualm@jimm.jp	1.13
16	第26回 電磁気応用部門・磁粉・浸透・目視部門・濡れ試験部門合同シンポジウム「表面探傷技術による健全性診断、品質検査」(東京)	日本非破壊検査協会	TEL 03–5609–4015 nakamura@jsndi.or.jp http://www.jsndi.jp/	参加 3.9
20	表面科学セミナー2023(実践編) 「マテリアルインフォマティクスの基礎と情報科学を用いた実験データ解析」(東京)	日本表面真空学会	TEL 03-3812-0266 office@jvss.jp https://www.jvss.jp/	3.16
20~4.10	第428回講習会「開かれた扉(ミライ) 〜JIMTOF2022 に見る最新工作機械技術〜」(オ ンライン)	精密工学会	TEL 03-5226-5191 https://www2.jspe.or.jp/form/koshukai/ koshukai_form.html	
27	第127回シンポジウム「軽金属材料の高強度化の 最前線」(東京)	軽金属学会	TEL 03–3538–0232 https://www.jilm.or.jp/	定員 100名
29	第241回研究会/第8回バイオマグネティックス 専門研究会「磁性材料を活用したバイオ・医療応 用」(オンライン)	日本磁気学会	TEL 03–5281–0106 http://www.magnetics.jp/event/topical_ 241/	
29	研究集会「ミルフィーユ構造物資におけるキンク 形成とキンク強化:これまでの成果と残された課 題」(オンライン)(本号209頁)	日本金属学会研究 会 No. 75 キンク 研究会	fujii.t.af@m.titech.ac.jp	3.22 17:00
30	腐食防食部門委員会 第347回例会(大阪)	日本材料学会	TEL 075–761–5321 jimu@office.jsms.jp http://www.jsms.jp/	
2023年 4 月			4	
18	2023年度春季講演会(オンライン)(本号209頁) 	九州支部	tsuchiyama.toshihiro.178@m.kyushu-u. ac.jp	
2023年5月 11~12	日本金属学会オンライン教育講座「医療用金属材	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312	事前
	料の基礎」(オンライン)(本号208頁)		meeting@jimm.jp	争即 4.27
12~14	軽金属学会第144回春期大会(香川大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 https://www.jilm.or.jp/	

212 本会記事

開催日	名称・開催地・掲載号	主催	問合先	締切
15~19	IEEE International Magnetics Conference(Intermag 2023) (仙台)	IEEE Magnetics Society	intermag2023@congre.co.jp	
16~6.2	第429回講習会「熟練者の技能伝承のデジタル化 〜最先端技術から応用事例まで〜」(Web 開催)	精密工学会	TEL 03-5226-5191 https://www2.jspe.or.jp/form/koshukai/ koshukai_form.html	
28	第8回マルチスケール材料力学シンポジウム(つくば)	日本材料学会	http://www.jsms.jp	
29~31	トライボロジー会議2023 春 東京(東京)	日本トライボロ ジー学会	TEL03-3434-1926 jast@tribology.co.jp https://www.tribology.jp/	
30~31	第39回希土類討論会(札幌)	日本希土類学会	TEL 06-6879-7352 kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp https://www.kidorui.org/	発表 1.31
31~6.2	第28回計算工学講演会(つくば)	日本計算工学会	TEL 03-3868-8957 office@jsces.org http://www.jsces.org/koenkai/28/	
2023年6月				
9~11	2023年度塑性加工春季講演会(名工大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	
26~28	日本顕微鏡学会第79回学術講演会(松江)	日本顕微鏡学会	TEL 03-6457-5156 jsm-post@microscopy.or.jp http://conference.wdc-jp.com/microscopy/ conf2023/index.html	
2023年7月				
$5\sim7$	第60回アイソトープ・放射線研究発表会(東京)	日本アイソトープ 協会	TEL 03-5395-8081 happyoukai@jrias.or.jp http://www.jrias.or.jp/seminar/cat11/	
20~21	第57回 X 線材料強度に関するシンポジウム(甲 府)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimu@office.jsms.jp https://www.jsms.jp/meeting/xsym_ regist.html	
30~8.4	第 26 回 IUPAC 化学熱力学国際会議 (ICCT - 2023) (豊中)	日本熱測定学会他	icct2023_office@chem.sci.osaka-u.ac.jp https://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/ micro/ICCT2023/index.html	定員 500名
2023年8月				
27~31	The International Conference on Sintering 2023 (Sintering 2023国際会議) (岐阜)	日本セラミックス 協会	info@sintering2021.org https://www.sintering2021.org/	参加 2.15
2023年 9 月				
6~8	2023年度工学教育研究講演会(広島大)	日本工学教育協会	TEL 03–5442–1021 kawakami@jsee.or.jp https://www.jsee.or.jp/	
19~22	日本金属学会秋期講演大会(富山大学五福キャン パス) (2023年 5 号会告予定)	日本金属学会	TEL 022–223–3685 annualm@jimm.jp	
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/	
2023年10月			MDV 000 000 0005 DAY 000 000 0010	
26~27 2023年11月	オンライン教育講座「金属の在留応力の測定」 (オンライン)	日本金属学会	TEL 022–223–3685 FAX 022–223–6312 meeting@jimm.jp	
	28th IFHTSE Congress in Yokohama(横浜)	第28回熱処理国	TEL 03-6661-7167	
13~16	25th IFFI15t Congress in 10konama (例识)	際会議組織委員会	ifhtse2023office@jsht.or.jp https://jsht.or.jp/ifhtse2023/index.html	
19~23	PRICM-11 (The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Prosessing)	KIM	TEL +81-2-573-6207 info@pricm11.org	
26~12.1	International Gas Turbine Congress 2023 Kyoto (IGTC2023 Kyoto) (京都)	日本ガスタービン 学会	TEL 03-3365-0095 gtsj-office@gtsj.or.jp https://igtc2023.org/	
2023年12月		e tame	TRIV. 00. 0007 0000 1 5 01	
11~16	The 3rd Materials Research Meeting (MRM2023) The 24th IUMRS-International Conference in Asia (IUMRS-ICA2023) (京都)	日本 MRS	TEL 03-6667-0922 info_mrm@jmru.org https://mrm2023.jmru.org/	
2024年 4 月			mmx	
12~15	日本金属学会春期講演大会(東京理科大学葛飾キャンパス)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 annualm@jimm.jp	



〈事務局より〉 本号に2023年度の講演大会の日程がわかるカレンダー付きのポスターを 同封しています. ご活用下さい.

まてりあ第62巻第3号(2023) 発行日 2023年3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** 発 行 人 山村英明

〒160-0002 東京都新宿区四谷坂町 10-10

日本金属学会会報「まてりあ」への投稿について

会報「まてりあ」をより多くの皆様にご活用していただけるよう投稿記事を歓迎いたします. 投稿規程,執筆要領および下記要領によりご投稿下さい.

~会報編集委員会~

(1) 種別(規定掲載頁)(規定字数内)

1. 入門講座(4頁)(9,340字)

金属のみならずセラミックス,高分子を含めた材料一般に関して境界領域の材料や物づくりの実際などの講義を通して広く会員に情報を提供する.

2. 講義ノート(6頁)(14,500字)

材料に関係する基礎学問分野についてわかりやすく講義してもらう.

3. プロムナード(4頁)(9,340字)

金属・材料に関する話題にかぎらず、社会、経済、歴史などを含む多くの分野からの「比較的短くて分かりやすく」「会員が教養として知って置くべき事柄」「提言」「トピックス的な話題」など.

4. 解 説(7頁)(17,100字)

新しい特定の問題を取り上げて、専門外の会員にも分かるように解説したもので、さらに勉強しようとする人のために参考となる文献も示しておく.

5. 最近の研究(8頁)(19,700字)

最近の重要な研究のうち、比較的せまい範囲のテーマを取り上げて、国内外の最近の研究成果を紹介する。各分野の現状、現在の問題点などを取り上げて、総括的に分かり易く記述したもので、その分野の研究を進める上で参考となる内容とする。

6. 技術資料(8頁)(19,700字)

直接実務に利用できるもので、実際に行う場合に必要な条件、装置の説明、あるいは技術的データの収集等により参考 資料として役立つもの.

7. 集 録(9頁)(22,300字)

文献を主眼として問題点を論じ、批判するもので今後の方針を示唆することをねらいとする. 文献のみを集録し解説を行うものも含む.

8. 実学講座(4頁)(9,340字)

特許取得,ベンチャー企業の設立,研究開発マネジメント, 教育法,学習法などについて記事にする.

9. 材料科学のパイオニアたち(5頁)(11,900字)

材料科学に携わった先人たちの偉業を紹介する.

10. 新進気鋭(4 頁)(9,340字)

"はばたく"は大学院修士課程修了者以上を対象とし、ここでは30歳前後の若手研究者を対象として研究・仕事の紹介と将来展望について紹介してもらう。執筆は単独名とする。

11. 材料教育(4頁)(9,340字)

材料教育に関する話題.

12. トピックス(制限頁;2頁)(4,150字)

最近の情報を手短に紹介するもので、話題は限定しない.

13. 物性・技術データ最前線(4頁)(9,340字)

形式は問わず、情報量は少なくとも、多く読者が必要するタイムリーな最新の物性、技術データを紹介する.

14. 材料ニュース(2頁)(4,150字)

新聞で発表された材料関連ニュースを新聞内容よりは詳しくできるだけ迅速に記事にする.

15. プロジェクト研究報告(有料)(原則35頁)

特定研究 A, B, 未来開拓, 戦略基礎などの公的資金補助によるプロジェクト研究成果を有料掲載する.

16. 産官学交差点(1頁)(2,200字)

材料に関係した産官学の情報交流の場を設ける.

17. 材料発ベンチャー(2頁)(4,150字)

材料関連ベンチャー企業の経験者に経験談等を記事にしてもらう.

18. 新技術·新製品裏話(2頁)(4,150字)

金属学会新技術・新製品技術開発賞を獲得したグループに開 発にあたっての苦労、裏話を紹介してもらう.

19. 談話室(1頁)(2,200字)

気軽な意見の発表, 学会に対する質疑応答, 情報交換等.

20. はばたく(1頁)(2,200字)

大学院生など新鋭の方々が、著者自身の研究への取り組み方などについて述べる.

21. 紹介(1頁)(2,200字)

組織変更・改革,産業界の動向その他.

- 22. 学会・研究会だより(1頁)(2,200字)
- 23. 研究室紹介(1~2頁)(2,200~4,700字)
- 24. 委員会だより
- 25. スポットライト

(2) 投稿の方法

- •種別の1~15については、執筆要領に定める方法で作成し、制限 頁以内にまとめた原稿とその論文または記事のねらい(200字~300字)をフォーマット用紙に記述して会報編集委員会までご送 信下さい、審議の上、受付の可否を決定します。
- •種別の16~25については、執筆要領に定める方法で作成し、制限 頁以内にまとめた原稿をお送り下さい。但し、原稿の採否や掲載 号は会報編集委員会にご一任下さい。

(3) 投稿の要件

• 和文であり論文又は記事として未投稿,未掲載でかつオリジナリティがあること,規定頁を超えないこと,金属とその関連材料の学術および科学技術の発展に寄与するものであること等,ホームページに掲載している会報投稿規程を参照して下さい.

(4) 著作権の帰属

会報に投稿された論文および記事の著作財産権は、この法人の著作権規程により、この法人に帰属します。

(5) その他留意事項

- 原稿は、専門外の読者にも分かるようにご執筆下さい.
- 原稿は、会報編集委員会にて審査いたします。その結果、場合に よっては掲載をお断りする場合があります。また、掲載号等につ いても、本編集委員会が決定いたします。
- 図表の引用に関しては、著作権者への転載許可手続きを著者ご自身で行ってください。
- 詳細は会報投稿規程をご覧下さい.

(6) 会報投稿規程と執筆要領

ホームページ: まてりあ → まてりあへの投稿 をご覧下さい.

(7) 原稿送付・問合せ先

〒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 会報編集委員会

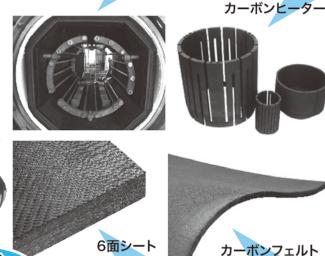
☎ 022-223-3685 [AX] 022-223-6312 E-mail: materia@jimm.jp

高断熱+省エネ

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

高温真空炉

- ■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







CO₂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



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) 1/2 P ¥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 HP www.meihosha.co.jp





- ◆ グローブボックス ◆ ガス循環精製装置
- ◆ クリーンオーブン ◆ドライルーム
- ◆ アイソレーター
- ◆ラミネート装置
- ◆ 高気密恒温恒湿室



概念 美和製作所

本社・工場 〒567-0028 大阪府茨木市畑田町 11番 50号 TEL: 072-625-1138 FAX: 072-625-1178 東京営業所 〒101-0042 東京都千代田区神田東松下町 32番地

TEL: 03-5256-1138 FAX: 03-5256-1145