

多成分系合金の粒界偏析計算と組成設計への応用

塚田 祐貴¹⁾ 松岡 佑亮²⁾ 小山 敏幸³⁾

1. はじめに

近年、種々の多成分系合金について、走査型透過電子顕微鏡-エネルギー分散型X線分光(STEM-EDS, Scanning Transmission Electron Microscopy-Energy Dispersive X-ray Spectroscopy), 三次元アトムプローブ(3DAP, Three-Dimensional Atom Probe)などを用いて粒界偏析を解析した結果が報告されている⁽¹⁾⁻⁽¹²⁾. 粒界偏析は様々な粒界特性を変化させ、材料特性に大きな影響を及ぼすため、粒界組成の予測・制御は材料開発における最重要テーマの一つである⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾. Gibbsの吸着式⁽¹⁵⁾によると、希薄溶体の場合、粒界における溶質元素*i*の過剰量 Γ_i は粒界エネルギー σ に及ぼす化学ポテンシャルの影響を考慮して

$$\Gamma_i = -\frac{1}{RT} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \ln x_i} \right)_T \quad (1)$$

によって計算される⁽¹⁶⁾. 式中の R は気体定数、 T は絶対温度、 x_i は溶質元素*i*の粒内濃度である. 多成分系合金について Γ_i を計算するには、粒界エネルギーの温度・組成依存性に関する情報が必要である. 一方、Langmuir-McCleanの式⁽¹⁷⁾は二成分系における粒界濃度 X と粒内濃度 x の関係を

$$\frac{X}{1-X} = \frac{x}{1-x} \exp \left(\frac{\Delta E}{RT} \right) \quad (2)$$

によって与える. 式中の ΔE は偏析エネルギーであり、主要な金属の二成分系の ΔE の実験値・計算値が蓄積されつつある⁽¹⁴⁾. 第一原理計算により偏析エネルギーを評価しLangmuir-McCleanの式を多成分系合金の粒界偏析計算に応用した例も報告されているが⁽⁶⁾, 個々の溶質元素について偏析エネルギーの組成依存性まで考慮することは難しい.

Hillertは粒界を均一な薄膜相とみなした粒界相モデルを

提案し、二成分系については結晶粒相と粒界相のGibbsエネルギー曲線に平行接線を引くことで粒界相の平衡組成(平衡偏析)が計算できることを示した⁽¹⁸⁾. Hillertの粒界相モデルは多成分系への拡張が可能であるが、偏析計算には単相のGibbsエネルギーの温度・組成依存性に関する情報が必要である. 計算状態図(CALPHAD, Calculation of Phase Diagram)⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾の分野においてデータベース化されている単相のGibbsエネルギーの情報を多成分系合金の粒界偏析予測に活用できることが望ましい.

本稿では、Hillertの粒界相モデルに基づき、CALPHADデータベースを用いてNi基超合金およびオーステナイト系ステンレス鋼の粒界組成(粒界相の平衡組成)を計算し、過去の実験値との比較により計算値の妥当性を確認した結果⁽²¹⁾を紹介する. さらに、近年開発が進められているオーステナイト系耐熱材料およびMg合金の粒界組成を計算し、CALPHADデータベースを用いた粒界組成計算が多成分系合金の粒界偏析・粒界析出制御に有用であることを示す.

2. Hillertの粒界相モデルに基づく粒界組成計算

Hillertの粒界相モデルに基づいた粒界組成計算法について説明する. 粒界を膜厚一定の薄膜相とみなし、結晶粒相を α 相、粒界相を β 相とおく. N 成分系における α 相および β 相の組成をそれぞれ $\mathbf{c}_\alpha = (c_\alpha^1, c_\alpha^2, \dots, c_\alpha^{N-1})^T$ および $\mathbf{c}_\beta = (c_\beta^1, c_\beta^2, \dots, c_\beta^{N-1})^T$ とおく. ただし、 $\cdot^T$ は $\cdot$ の転置を表す. α 相と β 相の二相系のGibbsエネルギーは温度と組成の関数として

$$G_c = G_c^\alpha(\mathbf{c}_\alpha, T) f_\alpha + G_c^\beta(\mathbf{c}_\beta, T) f_\beta + \lambda^T (\mathbf{c}_0 - \mathbf{c}_\alpha f_\alpha - \mathbf{c}_\beta f_\beta) \quad (3)$$

によって与えられる. f_α と f_β は各相の体積分率、 λ はラグランジュ未定乗数、 $\mathbf{c}_0$ は平均組成である. α 相と β 相の体積

* 名古屋大学大学院工学研究科; 1) 准教授 2) 大学院生 3) 教授(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)
Computation of Grain Boundary Segregation and Its Application to Compositional Design of Multicomponent Alloys; Yuhki Tsukada, Yusuke Matsuoka and Toshiyuki Koyama (Graduate School of Engineering, Nagoya University, Nagoya)
Keywords: multicomponent alloy, grain boundary segregation, grain-boundary-phase model, CALPHAD database, alloy design
2023年8月7日受理[doi:10.2320/materia.62.673]

分率が一定(結晶粒径が一定)のとき, G_c を最小にする $\mathbf{c}_\alpha$ と $\mathbf{c}_\beta$ は,

$$\frac{\partial G_c}{\partial \mathbf{c}_\alpha} = \left(\frac{\partial G_\alpha}{\partial \mathbf{c}_\alpha} - \lambda \right) f_\alpha = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial G_c}{\partial \mathbf{c}_\beta} = \left(\frac{\partial G_\beta}{\partial \mathbf{c}_\beta} - \lambda \right) f_\beta = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial G_c}{\partial \lambda} = \mathbf{c}_0 - \mathbf{c}_\alpha f_\alpha - \mathbf{c}_\beta f_\beta = 0 \quad (6)$$

より,

$$\frac{\partial G_\alpha}{\partial \mathbf{c}_\alpha} = \frac{\partial G_\beta}{\partial \mathbf{c}_\beta} \quad (7)$$

$$\mathbf{c}_0 = \mathbf{c}_\alpha f_\alpha + \mathbf{c}_\beta f_\beta \quad (8)$$

を満たすように決定される. 二成分系の場合, 図1(a)の Gibbs エネルギー-組成図に示すように, α 相と β 相の

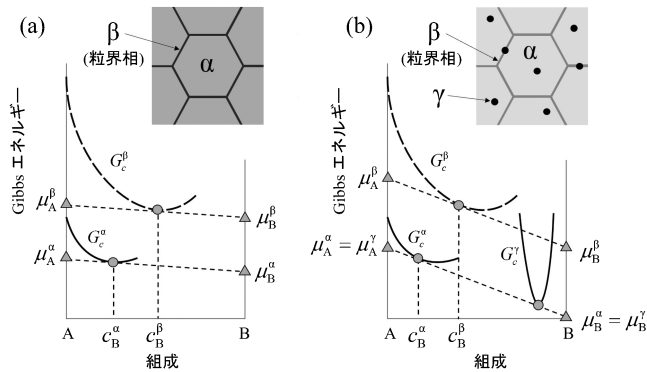


図1 二成分系における結晶粒相(α)と粒界相(β)の Gibbs エネルギー-組成図⁽²¹⁾: (a) α 単相多結晶組織の場合, (b) α 相が γ 相と平衡している場合. Hillert の粒界相モデルでは α 相と β 相の Gibbs エネルギー曲線に平行接線を引くことで粒界相の平衡組成が計算される(平行接線則).

Gibbs エネルギー曲線に平行接線を引いたときの接点が $\mathbf{c}_\alpha$ と $\mathbf{c}_\beta$ に対応する(平行接線則). 粒界組成の計算では, 次式で定義されるペナルティ関数 J を最小にする最適解を求める.

$$J = \left(\frac{\partial G_\alpha}{\partial \mathbf{c}_\alpha} - \frac{\partial G_\beta}{\partial \mathbf{c}_\beta} \right)^2 = \{ (\mu_\alpha - \mu_\beta) - \mathbf{e}(\mu_N^\alpha - \mu_N^\beta) \}^2 \quad (9)$$

ただし, $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$ であり, $\mu_\alpha = (\mu_1^\alpha, \mu_2^\alpha, \dots, \mu_{N-1}^\alpha)^T$ と $\mu_\beta = (\mu_1^\beta, \mu_2^\beta, \dots, \mu_{N-1}^\beta)^T$ はそれぞれ α 相と β 相の化学ポテンシャルである. 各相の化学ポテンシャルは熱力学計算ソフトウェア Thermo-Calc⁽²²⁾ と CALPHAD データベースを用いて計算する. ランダム粒界の平衡組成を計算対象とし, 粒界相をアモルファス相とみなして粒界相に液相の Gibbs エネルギーを割り当てる⁽²³⁾. また, 粒界相の体積分率は無視できるほど小さいとみなす($f_\beta = 0$). α 単相多結晶の場合は $\mathbf{c}_\alpha = \mathbf{c}_0$ であるが, α 相が他相と平衡している場合は, まず α 相の平衡組成($\mathbf{c}_\alpha$)を求めてから粒界組成($\mathbf{c}_\beta$)を計算する. 例えば, 二成分系において α 相と γ 相が平衡する場合の粒界組成計算は図1(b)に示す Gibbs エネルギー-組成図を使って図式的に理解することができる. まず α 相と γ 相の相平衡を計算し(α 相と γ 相の Gibbs エネルギー曲線に共通接線を引き), 次に計算された α 相組成から粒界組成を計算する(α 相と β 相の Gibbs エネルギー曲線に平行接線を引く). 図1(a)と(b)を比較すると, γ 相への溶質元素分配によって α 相の溶質濃度が減少すると β 相(粒界相)の溶質濃度も減少することがわかる.

3. 多成分系合金の粒界組成計算

まず, Ni 基超合金 Inconel617B の粒界組成を計算した結果について説明する. 合金組成は Ni-24.7Cr-11.4Co-5.2Mo-2.1Al-0.4Ti-0.3C-0.02B(at%)である⁽²⁾(粒界組成計

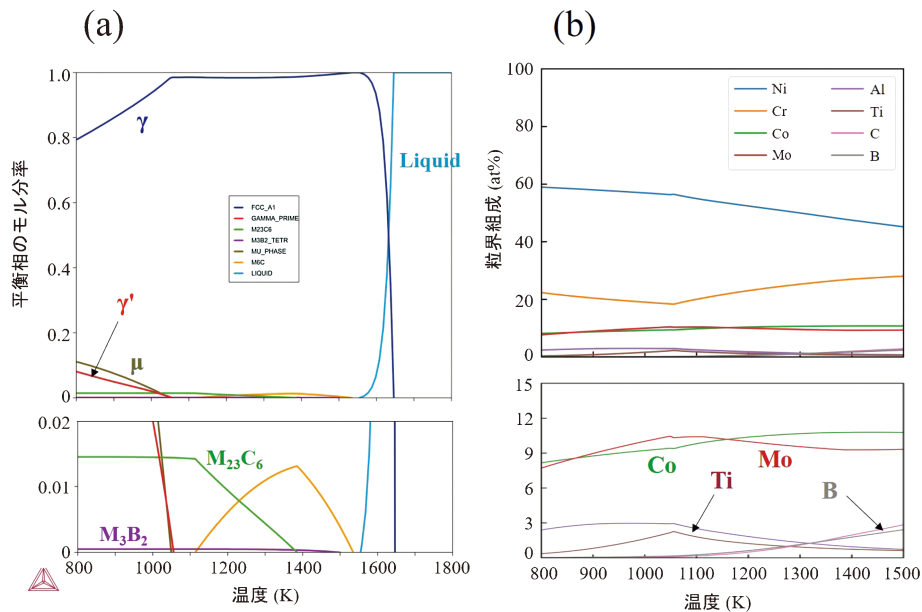


図2 Ni 基超合金 Inconel617B に対する計算結果⁽²¹⁾: (a) 平衡相分率の温度依存性, (b) 粒界組成の温度依存性(各温度で(a)に示した平衡相をすべて考慮). 下図は上図の縦軸を拡大したものである. 計算には熱力学データベース TTNI8⁽²⁴⁾を使用した.

算のコストを考慮し、Fe, Si, N, Mn, Cu は除外した)。熱力学データベース TTNI8⁽²⁴⁾を用いて計算した平衡相分率の温度依存性を図2(a)に示す⁽²¹⁾。主相 γ (fcc 固溶体) 以外の主要な構成相は、 γ' -Ni₃Al, μ (Topologically Close Packed (TCP) 相と呼ばれる有害相の一つ), $M_{23}(B, C)_6$, および M_3B_2 である。図2(a)に現れる平衡相をすべて考慮して計算した粒界組成の温度依存性を図2(b)に示す⁽²¹⁾。このように平衡計算の結果(図2(a))と並べて示すと各温度における平衡相と粒界組成の関係を理解しやすい。1500 K 以下の温度域で温度低下とともに B の粒界濃度が減少するが、これは B が M_3B_2 に分配して γ 相の B 濃度が減少することによる。同様に、1050 K 以下の温度域で温度低下とともに Co, Mo, Ti の粒界濃度が減少するが、これは Co, Mo が μ 相, Ti が γ' 相にそれぞれ分配し、 γ 相の Co, Mo, Ti の濃度が減少するためである。このように、多成分系の相平衡を考慮して粒界組成の温度依存性を解析できることが、CALPHAD データベースを用いた粒界組成計算の大きな利点である。

γ 相以外の相は考慮せずに、 γ 単相多結晶を想定して計算した Inconel617B の粒界組成の温度依存性を図3に示す⁽²¹⁾。すべての平衡相を考慮した計算結果(図2(b))とは対照的に、温度低下とともに Mo, B の粒界濃度が顕著に高くなる。1450 K における溶質元素の粒界濃度の計算値を図4(a)に示す⁽²¹⁾。Cr, Mo, B, C の粒界濃度は合金濃度(図中のひし形記号)より高く、これらの元素が粒界に偏析することがわかる。図中の丸記号は、Tytko らが 3DAP 解析で取得した実験データ⁽²⁾であり、1450 K で均質化処理した Inconel617B の粒界濃度を示している。粒界組成計算で Cr, Mo, B, C の偏析傾向が予測されているものの、偏析元素の粒界濃度の計算値と実験値の差が大きい。ここで、1100 K における溶質元素の粒界濃度の計算値を図4(b)に示す⁽²¹⁾。なお、図中の丸記号は 1450 K で均質化処理した試料の実験データである点に留意されたい。Mo, B の粒界濃度の計算値(1100 K)と実験値がよく一致している。この結果は、1450 K の均質化処理後の水冷過程の初期段階では粒界組成

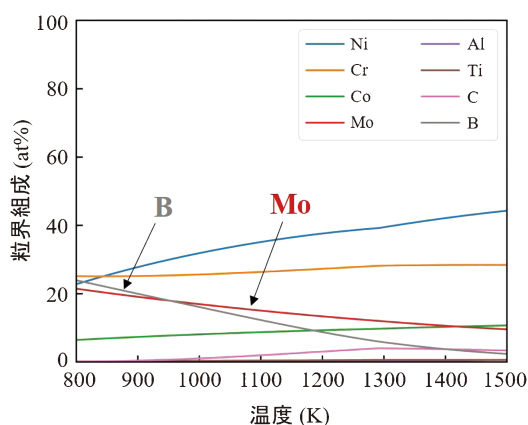


図3 Ni 基超合金 Inconel617B における粒界組成の温度依存性の計算結果(γ 単相多結晶を想定)⁽²¹⁾。計算には熱力学データベース TTNI8⁽²⁴⁾を使用した。

が変化しており、結果的に 1100 K 付近の粒界組成が低温まで凍結されたことを示唆している。また、Cr, Mo, B, C は $M_{23}(B, C)_6$ の構成元素であることから、これらの元素の粒界偏析が $M_{23}(B, C)_6$ の粒界析出を誘起する可能性が高い。実際に均質化処理後の水冷過程において粒界に薄いフィルム状の炭化物が析出している可能性が指摘されている⁽²⁾。

次に 316L オーステナイト系ステンレス鋼の粒界組成を計算した結果について説明する。合金組成は Fe-0.04C-1.03Si-1.53Mn-0.050P-10.71Ni-18.37Cr-1.25Mo-0.14Co-0.0005B(at%) である⁽¹⁰⁾(粒界偏析計算のコストを考慮し、S, N は除外した)。熱力学データベース TCFE11⁽²⁵⁾を用いて γ (fcc 固溶体) 単相多結晶を想定して計算した粒界組成の温度依存性を図5(a)に示す⁽²¹⁾。温度低下とともに P の粒界濃度が増加している。1316 K における溶質元素の粒界濃度の計算値を図5(b)に示す⁽²¹⁾。図中の丸記号は Tomozawa らが取得した 3DAP データ⁽¹⁰⁾であり、1316 K で溶体化処理した 316L 鋼の粒界濃度を示している。Mo, P, B, C の偏析傾向を計算で予測することができている。偏析元素 Mo, P, B, C の粒界濃度の計算値は Mo : 1.96 at%, P : 2.11 at%, B : 0.17 at%, C : 0.21 at% であり、偏析比(粒界濃度と合金濃度の比)は Mo : 1.6, P : 42, B : 340, C : 5.3 と計算され

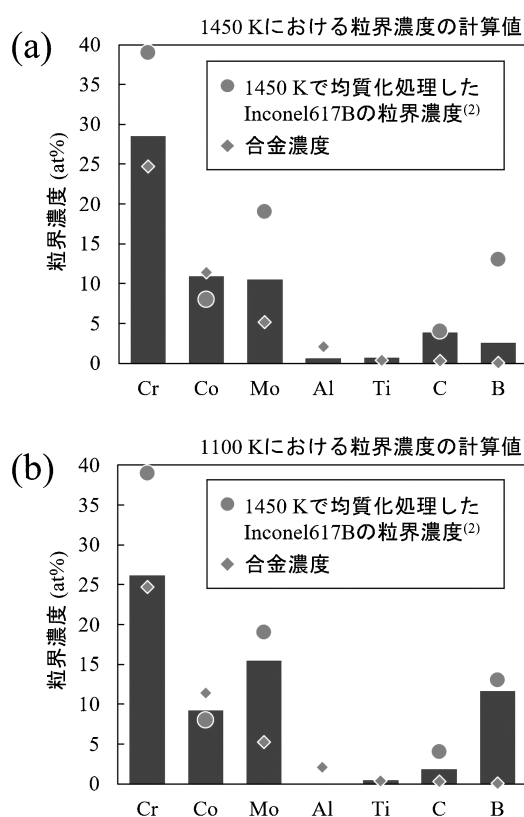


図4 Ni 基超合金 Inconel617B における溶質元素の粒界濃度の計算結果(γ 単相多結晶を想定)⁽²¹⁾ : (a) 1450 K, (b) 1100 K。図中の丸記号は 1450 K で均質化処理した Inconel617B の粒界濃度(3DAP データ)⁽²⁾であり、ひし形記号は合金濃度である。計算には熱力学データベース TTNI8⁽²⁴⁾を使用した。

る．この結果は偏析元素の中で B の偏析比が突出して高いという Tomozawa らの報告⁽¹⁰⁾と一致する．

以上の計算では，粒界相の体積分率は無視できるほど小さ

いとみなした($f_{\beta}=0$)．粒界相体積分率 f_{β} は結晶粒径 d の関数として

$$f_{\beta} = \left(\frac{3.165\Delta}{d} \right) \left(1 - \frac{1.055\Delta}{d} \right)^2 \quad (10)$$

によって計算される⁽²⁶⁾．式中の Δ は粒界幅である．粒界相の体積分率は結晶粒径の減少とともに増加する．上述の 316L 鋼の粒界組成計算において，結晶粒径，粒界相体積分率，および粒界組成の関係を解析した結果を表 1 に示す⁽²¹⁾．ただし， $\Delta=1 \text{ mm}$ とした． $d=300 \mu\text{m}$ の条件での粒界組成は $f_{\beta}=0$ とおいた場合の粒界組成とほぼ等しくなる．結晶粒径が小さくなるにつれて， $d=3\sim 6 \mu\text{m}$ の条件で Mo, B, P の粒界濃度がわずかに減少し， $d\leq 1 \mu\text{m}$ の条件では B, P の粒界濃度が大きく減少する．これらの結果から $d>10 \mu\text{m}$ の条件で粒界組成を計算する場合は粒界相体積分率を考慮する必要がないと判断できる．

4. 粒界偏析・粒界析出制御への応用

粒界偏析・粒界析出制御を図る上で CALPHAD データベースを用いた粒界組成計算が有用であることを示す二つの事例を紹介する．Takeyama らは粒界に Fe_2Nb Laves 相，粒内に Ni_3Nb 相を析出させた炭素無添加の新規オーステナイト系耐熱材料を提案し，既存のオーステナイト系耐熱鋼よりも優れた長時間クリープ破断強度を有することを示した^{(27)–(29)}．この材料は Laves 相の粒界被覆率(全粒界面積に対する Laves 相の析出した粒界面積の割合)の増加とともに最小クリープ速度が減少しクリープ破断強度が上昇する．溶体化処理後に Laves 相のみが析出する 1073 K において 240 h 熱処理した Fe-20Cr-30Ni-2Nb(at%) および Fe-20Cr-30Ni-2Nb-0.03B(at%) の反射電子像をそれぞれ図 6(a) および(b)の上段に示す⁽²⁸⁾．どちらの材料も Laves 相が粒界と粒内に析出するが，Laves 相の粒界被覆率は図 6(a)の B 無添加材で 43% であるのに対し，図 6(b)の B 添加材では 80% に達する．このように B の微量添加は Laves 相の粒界析出を著しく促進するが，そのメカニズムは不明であった．図 6

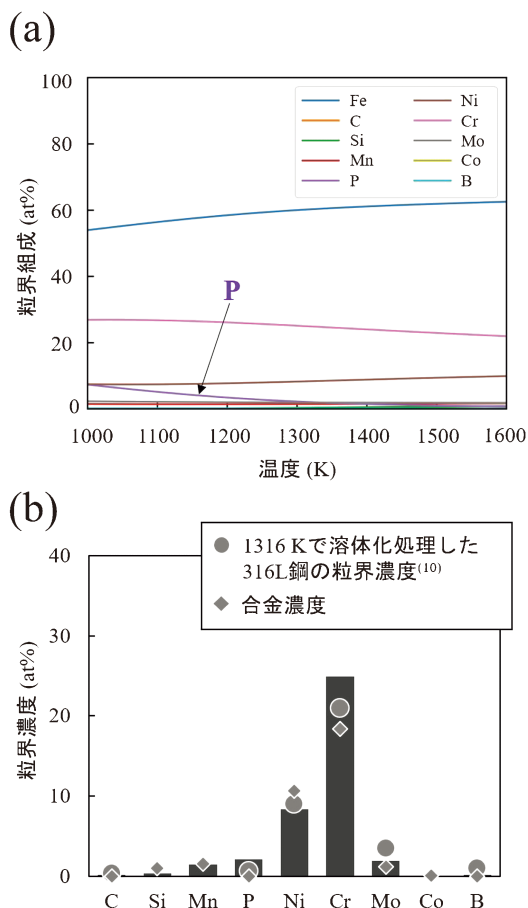


図 5 オーステナイト系 316L ステンレス鋼に対する計算結果⁽²¹⁾：(a) 粒界組成の温度依存性(γ 単相多結晶を想定)，(b) 1316 K における溶質元素の粒界濃度．(b) の図中の丸印は 1316 K で溶体化処理した 316 L 鋼の粒界濃度(3DAP データ)⁽¹⁰⁾であり，ひし形記号は合金濃度である．計算には熱力学データベース TCFE11⁽²⁵⁾を使用した．

表 1 316L オーステナイト系ステンレス鋼の 1316 K における粒界組成の結晶粒径依存性⁽²¹⁾．計算では γ 単相多結晶を想定し，熱力学データベース TCFE11⁽²⁵⁾を使用した．

粒界相体積分率, f_{β}	結晶粒径, $d / \mu\text{m}$	粒界組成 (at%)									
		Fe	C	Si	Mn	P	Ni	Cr	Mo	Co	B
0	∞	bal.	0.21	0.40	1.49	2.11	8.36	24.95	1.96	0.11	0.17
1.05×10^{-5}	300	bal.	0.21	0.40	1.49	2.11	8.36	24.95	1.96	0.11	0.17
5.27×10^{-4}	6	bal.	0.21	0.40	1.48	2.10	8.36	24.95	1.96	0.11	0.17
1.05×10^{-3}	3	bal.	0.21	0.41	1.48	2.07	8.36	24.95	1.95	0.11	0.14
3.16×10^{-3}	1	bal.	0.21	0.43	1.47	1.93	8.36	24.96	1.92	0.11	0.09
6.32×10^{-3}	0.5	bal.	0.21	0.45	1.46	1.73	8.36	24.96	1.89	0.11	0.06

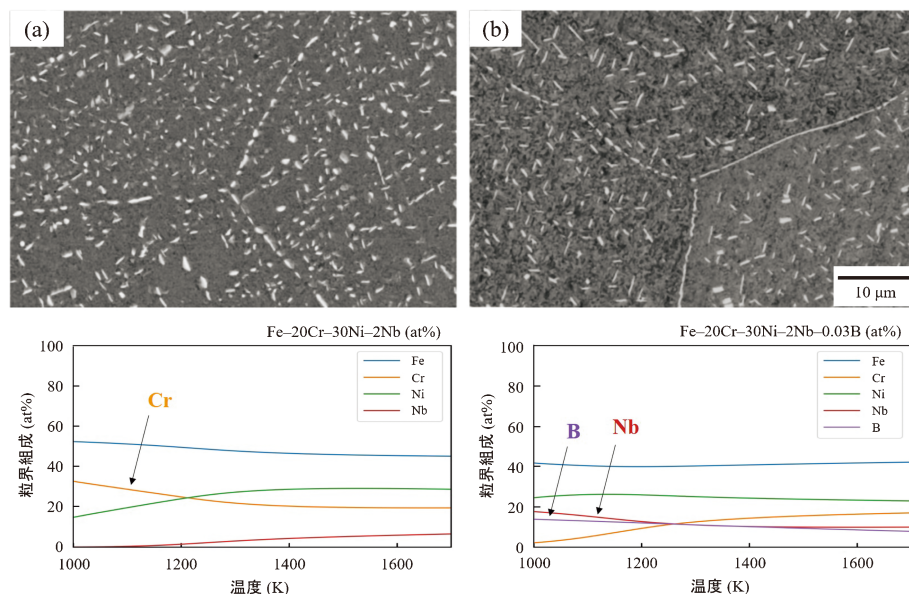


図6 溶体化処理後に1073 Kで240 h熱処理したオーステナイト系耐熱材料の反射電子像(上段)⁽²⁸⁾と粒界組成の温度依存性の計算結果(下段)：(a) Fe-20Cr-30Ni-2Nb(at%)，(b) Fe-20Cr-30Ni-2Nb-0.03B(at%)．粒界組成計算では γ 単相多結晶を想定し，熱力学データベースTCFE12⁽²⁵⁾を使用した．

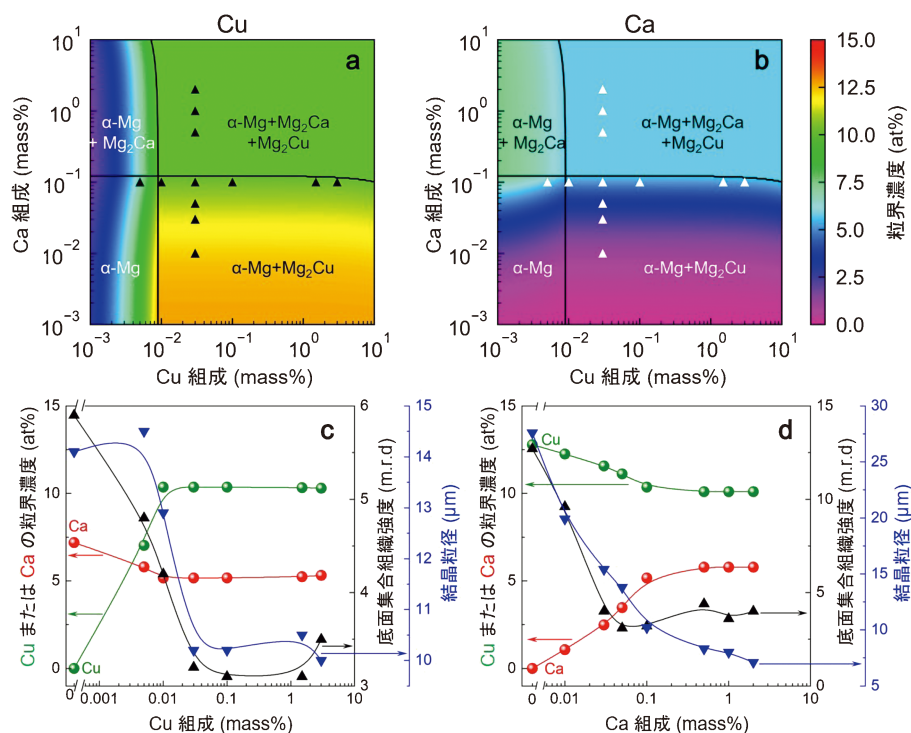


図7 Mg-Cu-Ca合金における粒界濃度(573 Kにおける計算値)と底面集合組織強度ならびに結晶粒径(実験値)の関係⁽³⁹⁾：(a) Cuの粒界濃度の合金組成依存性，(b) Caの粒界濃度の合金組成依存性，(c) Mg-xCu-0.1Ca(mass%)合金のCuおよびCaの粒界濃度と底面集合組織強度ならびに結晶粒径の関係，(d) Mg-0.03Cu-yCa(mass%)合金のCuおよびCaの粒界濃度と底面集合組織強度ならびに結晶粒径の関係．底面集合組織強度は底面極点図における極密度の最大値に対応する(m.r.dはmultiples of a random distributionの略号)．粒界組成計算では α -Mg， Mg_2Cu ，および Mg_2Ca の相平衡を考慮し，熱力学データベースTCMG6⁽²⁵⁾を使用した．

(a)と(b)の下段に，各合金について γ (fcc固溶体)単相多結晶を想定して計算した粒界組成の温度依存性を示す．なお，計算には熱力学データベースTCFE12⁽²⁵⁾を用いた．B無添加材では温度低下とともにCrが粒界に偏析する傾向があ

る．一方，B添加材ではNbとBが粒界に共偏析する傾向があり，温度低下とともにNbとBの粒界濃度が増加する．これらの計算結果から，B添加材においては熱処理中にLaves相の構成元素であるNbが粒界に偏析してLaves相の

粒界析出が誘起され Laves 相の粒界被覆率が増加したと理解することができる。種々の材料の粒界偏析・粒界析出制御において、粒界組成計算を活用した合金組成設計が可能と思われる。

次に Mg 合金における粒界偏析制御の事例を紹介する。圧延・熱処理した Mg 板材は六方晶の c 軸が板厚方向に配向した底面集合組織が形成される。さらに室温において非底面すべりが生じ難いこともあり、Mg 板材の室温成形性は低く⁽³⁰⁾、その工業製品としての用途が限られる。近年、室温成形性を改善するための合金開発が進められており、Mg-Zn-Ca 系および Mg-Zn-RE (RE: 希土類元素) 系合金が良好な室温成形性を示すことが報告されている⁽³¹⁾⁽³²⁾。Mg-Ca 系、Mg-Zn 系、および Mg-RE 系において溶質元素が粒界に偏析し⁽³³⁾⁻⁽³⁶⁾、Mg-Zn-Ca 系においては Zn と Ca が粒界に共偏析する⁽³⁶⁾ことが確認されている。溶質元素の粒界偏析は底面集合組織の形成を抑制すると考えられており、実際に Mg-X 系および Mg-Zn-Ca 系において粒界偏析と底面集合組織形成の間の相関関係が見出されている⁽³⁷⁾⁽³⁸⁾。

Bian らは良好な室温成形性を示した合金系について構成元素の原子半径、混合エンタルピーに共通則を見出し、室温成形性の改善が期待できる新しい合金系として Mg-Cu-Ca 系を提案した⁽³⁹⁾。圧延後熱処理温度 573 K において計算した Cu と Ca の粒界濃度の合金組成依存性をそれぞれ図 7(a) と (b) に示す⁽³⁹⁾。なお、計算には熱力学データベース TCMG6⁽²⁵⁾を用い、 α -Mg、 Mg_2Cu 、および Mg_2Ca の相平衡を考慮した。図 7(a), (b) から、わずか 0.1 mass% 以下の Cu および Ca の共添加によりこれらの元素が粒界に共偏析することがわかる。種々の組成 (Fig. 7(a), (b) の三角記号) の合金の集合組織強度および結晶粒径 (実験値) と粒界組成 (計算値) の関係を整理した結果を図 7(c), (d) に示す⁽³⁹⁾。Cu や Ca の添加量を増やすとそれらの元素の粒界濃度が増加し、集合組織強度の低下および結晶粒径の減少につながる。また、Cu や Ca を過剰に添加すると Mg_2Cu や Mg_2Ca が析出するため (図 7(a), (b) に溶解度線を黒線で示してある)、Cu や Ca の粒界濃度や集合組織強度に変化が見られなくなる。この研究で開発された Mg-0.03Cu-0.05Ca (mass%) 合金は優れた室温成形性・放熱性・耐食性を示しており⁽³⁹⁾、粒界偏析制御によって新合金の開発に成功した事例である。

5. お わ り に

本稿では Hillert の粒界相モデルと CALPHAD データベースを組み合わせた粒界偏析計算手法を紹介した。CALPHAD データベースを用いて計算される平衡偏析は「粒界偏析の地図」であり、今後、粒界偏析・粒界析出制御を念頭に置いた合金組成設計を強く後押しすると思われる。また、本手法はランダム粒界の偏析を計算対象とし、粒界相に液相の Gibbs エネルギーを割り当てている。一方、第一原理計算や分子動力学計算を用いる場合、計算コストの観点から対

応粒界の偏析を計算対象にすることが多い。それぞれの計算手法の長所を生かしつつ、用途や目的に応じてこれらの計算手法をうまく使い分けて、粒界偏析の理解・予測・制御につなげていくことが重要である。

本稿で紹介した研究は、JSPS 科研費 JP21K04687、MEXT 科研費 JP18H05454、JP23H05419、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事業 JPMXP1122684766 の助成を受けて実施した。研究の遂行にあたり、名古屋大学大学院生 (現在: トヨタ自動車株式会社) の舟本将崇氏、名古屋大学大学院生の榎田春菜氏にご協力いただいた。ここに謝意を表す。

文 献

- (1) D. H. Ping, Y. F. Gu, C. Y. Cui and H. Harada: Mater. Sci. Eng. A, **456**(2007), 99-102.
- (2) D. Tytko, P. P. Choi, J. Klöwer, A. Kostka, G. Inden and D. Raabe: Acta Mater., **60**(2012), 1731-1740.
- (3) S. Antonov, J. Huo, Q. Feng, D. Isheim, D. N. Seidman, R. C. Helmink, E. Sun and S. Tin: Scr. Mater., **138**(2017), 35-38.
- (4) P. A. J. Bagot, O. B. W. Silk, J. O. Douglas, S. Pedrazzini, D. J. Crudden, T. L. Martin, M. C. Hardy, M. P. Moody and R. C. Reed: Acta Mater., **125**(2017), 156-165.
- (5) A. Després, S. Antonov, C. Mayer, C. Tassin, M. Veron, J. J. Blandin, P. Kontis and G. Martin: Materialia, **19**(2021), 101193.
- (6) A. S. Ebner, S. Jakob, H. Clemens, R. Pippan, V. M. Kiener, S. He, W. Ecker, D. Scheiber and V. I. Razumovskiy: Acta Mater., **221**(2021), 117354.
- (7) A. Etienne, B. Radigue, N. J. Cunningham, G. R. Odette, R. Valiev and P. Pareige: Ultramicroscopy, **111**(2011), 659-663.
- (8) Z. Jiao and G. S. Was: Acta Mater., **59**(2011), 1220-1238.
- (9) T. Toyama, Y. Nozawa, W. V. Renterghem, Y. Matsukawa, M. Hatakeyama, Y. Nagai, A. A. Mazouzi and S. V. Dyck: J. Nucl. Mater., **425**(2012), 71-75.
- (10) M. Tomozawa, Y. Miyahara and K. Kako: Mater. Sci. Eng. A, **578**(2013), 167-173.
- (11) S. V. Fedotova, E. A. Kuleshova, D. A. Maltsev and M. A. Saltykov: J. Nucl. Mater., **528**(2020), 151865.
- (12) M. Heczko, V. Mazánová, R. Gröger, T. Zálezák, M. S. Hooshmand, E. P. George, M. J. Mills and A. Dlouhý: Acta Mater., **208**(2021), 116719.
- (13) D. Raabe, M. Herbig, S. Sandlöbes, Y. Li, D. Tytko, M. Kuzmina, D. Ponge and P. P. Choi: Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., **18**(2014), 253-261.
- (14) P. Lejček, M. Šob and V. Paidar: Prog. Mater. Sci., **87**(2017), 83-139.
- (15) J. W. Gibbs: The Scientific Papers of J. W. Gibbs, Vol. 1, thermodynamics, Dover, New York, (1961).
- (16) G. H. Meier: Thermodynamics of Surfaces and Interfaces, Concepts in Inorganic Materials, Cambridge University Press, Cambridge, (2014).
- (17) D. McLean: Grain Boundaries in Metals, Oxford University Press, London, (1957).
- (18) M. Hillert: Applications of Gibbs Energy-Composition Diagrams, Lectures on the theory of phase transformations, 2nd edition, ed. by H. Aaronson, TMS, Warrendale, (1999).
- (19) N. Saunders and A. P. Miodownik: Calphad, A Comprehensive Guide, Pergamon, Oxford, (1998).
- (20) H. L. Lukas, S. G. Fries and B. Sundman: Computational Thermodynamics, The Calphad Method, Cambridge University Press, Cambridge, (2007).

- (20) M. Funamoto, Y. Matsuoaka, Y. Tsukada and T. Koyama: Sci. Technol. Adv. Mater. Meth., **2**(2022), 322–333.
- (22) J. O. Andersson, T. Helander, L. Höglund, P. Shi and B. Sundman: Calphad, **26**(2002), 273–312.
- (23) H. Ohtani and M. Enoki: Thermodynamic Study of Grain Boundary Segregation, Proc. of the 5th International Symposium on Steel Science, ed. by S. Ii, T. Furuhara, T. Tsuchiyama, G. Miyamoto, The Iron and Steel Institute of Japan, Tokyo, (2017).
- (24) N. Saunders, M. Fahrmann and C. J. Small: The Application of Calphad Calculations to Ni-Based Superalloys, Superalloys 2000, ed. by T. Pollock, R. Kissinger, R. Bowman, K. Green, M. McLean, S. Olson, J. Schirra, TMS, Warrendale, (2000).
- (25) <https://thermocalc.com/products/databases/> (2023年8月21日閲覧).
- (26) Y. Zhou, U. Erb and K. T. Aust: Philos. Mag., **87**(2007), 5749–5761.
- (27) I. Tarigan, K. Kurata, N. Takata, T. Matsuo and M. Takeyama: Mater. Res. Soc. Symp. Proc., **1295**(2011), 317–322.
- (28) 味噌作裕, Imanuel Tarigan, 木村堯朗, 高田尚記, 上田光敏, 丸山俊夫, 竹山雅夫: 鉄と鋼, **100**(2014), 1158–1164.
- (29) N. Kanno, K. Yoshimura, N. Takata, I. Tarigan and M. Takeyama: Mater. Sci. Eng. A, **662**(2016), 551–563.
- (30) B. C. Suh, M. S. Shim, K. S. Shin and N. J. Kim: Scr. Mater., **84–85**(2014), 1–6.
- (31) J. Bohlen, M. R. Nürnberg, J. W. Senn, D. Letzig and S. R. Agnew: Acta Mater., **55**(2007), 2101–2112.
- (32) Y. Chino, X. Huang, K. Suzuki and M. Mabuchi: Mater. Trans., **51**(2010), 818–821.
- (33) J. P. Hadorn, K. Hantzsche, S. Yi, J. Bohlen, D. Letzig, J. A. Wollmershauser and S. R. Agnew: Metall. Mater. Trans. A, **43**(2012), 1347–1362.
- (34) J. P. Hadorn, T. T. Sasaki, T. Nakata, T. Ohkubo, S. Kamado and K. Hono: Scr. Mater., **93**(2014), 28–31.
- (35) M. Bugnet, A. Kula, M. Niewczas and G. A. Botton: Acta Mater., **79**(2014), 66–73.
- (36) Z. R. Zeng, Y. M. Zhu, S. W. Xu, M. Z. Bian, C. H. J. Davies, N. Birbilis and J. F. Nie: Acta Mater., **105**(2016), 479–494.
- (37) 石黒雄也, 黄新勝, 塚田祐貴, 小山敏幸, 千野靖正: 日本金属学会誌, **84**(2020), 318–325.
- (38) 城秀幸, 鈴木一孝, 黄新勝, 塚田祐貴, 小山敏幸, 千野靖正: 日本金属学会誌, **85**(2021), 382–390.
- (39) M. Bian, I. Nakatsugawa, Y. Matsuoaka, X. Huang, Y. Tsukada, T. Koyama and Y. Chino: Acta Mater., **241**(2022), 118393.
- ★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
塚田祐貴
2011年3月 名古屋大学大学院工学研究科博士課程修了
2011年8月 名古屋工業大学大学院工学研究科 助教
2015年4月 名古屋大学大学院工学研究科 助教
2016年11月– 現職
専門分野: 計算材料組織学
◎主にフェーズフィールド法による材料組織形成モデリングに関する研究に従事。最近は機械学習やデータ同化による組織の計算モデルと実験データの融合に関する研究も行っている。
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
- 

塚田祐貴



松岡佑亮



小山敏幸