

日本金属学会
状態図・計算熱力学研究会 第5回研究会「学生限定講演」
協賛: 一社合金状態図研究会

2023年11月21日(火) 12:55~17:00
オンライン開催(Teams)
講演時間: 10分, Q&A: 5分(目安)

12:55 ~ 13:00 開会挨拶・そのほか NIMS 阿部 太一

第一部 13:00 ~ 14:30

座長 計算力学研究センター 佐々木崇宏

Mg-TM-Y系合金における状態図の実験的確立とそれに基づく合金開発への考察

○半田優斗 M2(1), 山形遼介(1), 糸井貴臣(1), 堀内寿晃(2), 三浦誠司(3)

千葉大学(1), 北海道科学大学(2), 北海道大学(3)

熔融塩中での不均化反応を利用したTi-Al合金粉末の形成

○Terigele D1, 竹田修, 朱鴻民

東北大学

溶鋼中アルミナ介在物生成機構を評価するためのAl-Fe-O状態図作成

○劉宇星 D1(1), 安井伸太郎(1), 伊藤あゆみ(1), 小林能直(1), 阿部太一(2)

東京工業大学(1), NIMS(2)

自動微分を用いた拡散対プロファイルの逆問題解析

○櫻井一輝 M2, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸

名古屋大学

Mn-Al-X三元系合金における τ 相の安定性と磁気特性

○枝川公香 M1, 許焜, 大森俊洋, 貝沼亮介

東北大学

金属Sm精錬の高純度化を目指したSm-La-O系熱力学アセスメント

○山田真琴 M2(1), 中沢亮太(1), 安井伸太郎(1), 伊藤あゆみ(1), 小林能直(1), 阿部太一(2)

東京工業大学(1), NIMS(2)

14:30 ~ 14:50 講演者インタビュー1 NIMS 阿部 太一

14:50 ~ 15:00 休憩(適宜)

第二部 15:00 ~ 16:30

座長 NIMS 池田亜矢子

フェーズフィールド法による2次元デンドライトの機械学習を用いた2次元アームの抽出

○藤原紳也 M1(1), 児嶋佑太(1), 大出真知子(2), 村松真由(1)

慶應義塾大学(1), NIMS(2)

累積的な熱影響を受ける工具鋼の組織変化

○福富友哉 B4, 田中浩司

大同大学

Mn-Zn 二元系における相平衡の決定

○今富大介 M2(1), 石川遼典(1)(現:神戸製鋼), 仲田玲(1)(現:古河電工), 伊東達矢(1,2), 韓光植(1,3), 長迫実(1), 許晶(1), 大森俊洋(1), 貝沼亮介(1)

東北大学(1), JAEA(2), NIMS(3)

Fe-Pt 合金の CALPHAD 法による熱力学アセスメントおよび Phase-field シミュレーション

○田中まりの M1(1), 村松真由(1), 大出真知子(2), 阿部太一(2)

慶應義塾大学(1), NIMS(2)

TiZrAl ハイエントロピー合金の第一原理計算による相安定性と格子ひずみの評価

○吉野哲生 M2(1), 佐原亮二(2), 松永紗英(1), 御手洗容子(1)

東京大学(1), NIMS(2)

高温 Fe-Zr 融体中 Zr 活量に及ぼす Ni 添加の熱力学的評価

○Weirong Yang D1(1), 安井伸太郎(1), 伊藤あゆみ(1), 小林能直(1), 阿部太一(2)

東京工業大学(1), NIMS(2)

16:30 ~ 16:50 講演者インタビュー2 NIMS 阿部 太一

16:50 ~ 17:00 閉会挨拶 NIMS 阿部 太一

第一部

Mg-TM-Y 系合金における状態図の実験的確立とそれに基づく合金開発への考察

○半田優斗 M2(1), 山形遼介(1), 糸井貴臣(1), 堀内寿晃(2), 三浦誠司(3)

千葉大学(1), 北海道科学大学(2), 北海道大学(3)

【概要】 Mg に特定の遷移金属元素 (TM)と希土類元素 (RE)を添加した合金は LPSO 相を生成し、圧延や押し出し後に優れた機械的性質が得られることから注目されている。しかし、LPSO 相型 Mg 合金においては、どの組成の合金を設計すればよいのかを考えるうえで指針となる状態図の報告が少ない。そこで、本研究では熱間加工温度域における Mg-TM (Ni, Cu, Zn, Al)-Y 合金の状態図を EPMA を用いて確立し、機械的性質も併せて調査することで合金設計に対する考察を行った。

熔融塩中での不均化反応を利用した Ti-Al 合金粉末の形成

○Terigele D1, 竹田修, 朱鴻民

東北大学

【概要】 チタン材は活性かつ難加工性であるため、機械加工のコストが高い。粉末冶金法はチタン加工コストの低減に期待されるが、低コストで高品質な粉末の製造が必要である。本研究では、熔融塩におけるチタンイオンの不均化反応および均化反応のシャトルを利用し、Ti と Al のバルク金属を出発原料とし、均一な Ti-Al 合金粉末の作製を目的とした。結果として、600°C以下で作製した粉末は均一な $TiAl_3$ であったが、より高温で作製した粉末は $TiAl_3$ と $TiAl_2$ の混合物であっ

た。

溶鋼中アルミナ介在物生成機構を評価するための Al-Fe-O 状態図作成

○劉宇星 D1(1)、安井伸太郎(1)、伊藤あゆみ(1)、小林能直(1)、阿部太一(2)
東京工業大学(1), NIMS(2)

【概要】 溶鋼中にアルミナ介在物が存在しており、製鋼プロセスにおいてノズル閉塞現象につながるため、アルミナ介在物の生成・改質機構を評価することを研究の目的とする。そこで、Al-Fe-O 状態図中に実験データを入れることで、アルミナ介在物の経時変化が評価できるので、Thermo-Calc を勉強し Al-Fe-O 状態図を作成した。本報告では、Al-Fe-O 状態図の作成状況と実験データの考察を議論する。

自動微分を用いた拡散対プロファイルの逆問題解析

○櫻井一輝 M2, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸
名古屋大学

【概要】 拡散対プロファイルは、実験状態図の二相領域の決定、また単相内の拡散係数の決定に広く活用されている。本報告では、フェーズフィールドシミュレーションに、拡散対プロファイルの実験情報を同化させることによって、フェーズフィールドシミュレーション内で使用される材料パラメータを、自動微分を用いて逆問題式に推定する手法について説明する。

Mn-Al-X 三元系合金における τ 相の安定性と磁気特性

○枝川公香 M1、許焜、大森俊洋、貝沼亮介
東北大学

【概要】 Mn-Al 二元系で化学量論組成よりも Mn-rich な組成域で観察される $L1_0$ 構造を有する τ 相は、強磁性で磁気異方性が大きい、準安定相であり最終的に非磁性相に分解する。 τ 相は C 添加により安定化することから MnAlC 磁石が実用化されているものの、依然として準安定相であり更なる安定化が必要である。 τ 相安定性への添加元素の影響は、従来よりも Mn 濃度の低い組成域では報告が少ないことから、本研究では、このような Mn 組成域の Mn-Al 合金に Au, Pt を添加した際の τ 相安定性について調査を行った。

金属 Sm 精錬の高純度化を目指した Sm-La-O 系熱力学アセスメント

○山田真琴 M2(1)、中沢亮太(1)、安井伸太郎(1)、伊藤あゆみ(1)、小林能直(1)、阿部太一(2)
東京工業大学(1), NIMS(2)

【概要】 希土類金属の一種であるサマリウム(Sm)は機能性材料に用いられるため製造過程における高純度化が必要である。Sm の製造方法には金属熱還元蒸留法が用いられ、酸化サマリウムを金属ランタン(La)と混合し、熱還元することにより得られる。現状 Sm-La-O 系の十分な熱力学データの報告がない。そこで本研究では化学平衡法を用いて平衡データの取得とデータを用いた熱力学アセスメントを行い、Sm-La-O 系状態図の作成を目的とする。

第二部

フェーズフィールド法による 2 次元デンドライトの機械学習を用いた 2 次アームの抽出

○藤原紳也 M1(1)、児嶋佑太(1)、大出真知子(2)、村松眞由(1)
慶應義塾大学(1), NIMS(2)

【概要】 デンドライトは微細な樹枝状の結晶であり材料特性に影響を与えるため、その成長予測は工学的に重要な課題である。デンドライトの評価基準として、分岐した結晶構造である二次アームが用いられる。しかし、二次アームは人による目視で経験則的に判別されてきた。そこで本研究ではフェーズフィールド法で生成したデンドライトに対して、機械学習モデルである U-net を用い

て二次アームを判別できることを確認する。

累積的な熱影響を受ける工具鋼の組織変化

○福富友哉 B4, 田中浩司

大同大学

【概要】 工具鋼 SKD61 をレーザー積層すると、累積的な熱影響が加わり造形方向の硬さが不均一になる。 γ 相から α 相+炭化物生成領域まで繰り返し誘導加熱し、硬さ変化と組織変化を調べた。熱力学計算の結果、加熱時に硬化要因の γ 逆変態と、軟化要因の炭化物析出が競合することが推測された。また、低 Si-低 Cr 化により γ 逆変態の下限温度が低下することで軟化が抑制されることが分かった。

Mn-Zn 二元系における相平衡の決定

○今富大介 M2(1), 石川遼典(1)(現:神戸製鋼), 仲田玲(1)(現:古河電工), 伊東達矢(1,2), 韓光植(1,3), 長迫実(1), 許焜(1), 大森俊洋(1), 貝沼亮介(1)

東北大学(1), JAEA(2), NIMS(3)

【概要】 車体に利用される高 Mn 鋼はオーステナイト状態の 800 °C でプレス加工されるが、その前に 450°C で溶融亜鉛めっき処理が施される。この処理において鋼材/Zn めっき間に形成される金属間化合物の相安定性が耐食性に影響を及ぼすことから、正確な Fe-Mn-Zn 状態図が必要とされている。しかし、基本情報となる Mn-Zn 側の相平衡が未だ不正確であることから、実験的に再決定を行った。

Fe-Pt 合金の CALPHAD 法による熱力学アセスメントおよび Phase-field シミュレーション

○田中まりの M1(1), 村松真由(1), 大出真知子(2), 阿部太一(2)

慶應義塾大学(1), NIMS(2)

【概要】 Fe-Pt 合金の Phase-field シミュレーションは熱アシスト磁気記録(HAMR)の開発において重要である。一方で、結果に大きく影響を与える Fe-Pt 合金の Gibbs エネルギーはこれまでに正確な値が求まっていない。そこで、本研究では CALPHAD 法による熱力学アセスメントを行い Fe-Pt 合金の Gibbs エネルギーを求め、得られた値の妥当性を材料学的視点から確認する。さらに、得られた Gibbs エネルギーを用いて Phase-field シミュレーションを行い、従来値を用いた結果との比較を行う。

TiZrAl ハイエントロピー合金の第一原理計算による相安定性と格子ひずみの評価

○吉野哲生 M2(1), 佐原亮二(2), 松永紗英(1), 御手洗容子(1)

東京大学(1), NIMS(2)

【概要】 本研究では、HCP 構造を安定化させる元素の組み合わせおよび固溶強化に有効な元素の組み合わせを探索するために、TiZrAl 合金を基礎とし、第 4,5 元素を添加した合金について第一原理計算を用いて相安定性と固溶強化に影響を与える格子ひずみの評価のために、原子間距離を計算した。

高温 Fe-Zr 融体中 Zr 活量に及ぼす Ni 添加の熱力学的評価

○Weirong Yang D1(1), 安井伸太郎(1), 伊藤あゆみ(1), 小林能直(1), 阿部太一(2)

東京工業大学(1), NIMS(2)

【概要】 In Unit 2 of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station, Zr-containing metallic debris could have been formed, relocated into the lower plenum, and re-melted at a temperature lower than the melting point of metallic oxides, followed by the failure of reactor pressure vessel (RPV). The Zr-Ni-Fe ternary system is an important subsystem to evaluate chemical interaction between the re-molten metallic debris with stainless-steel and Ni-alloy based structure located in the lower

head of RPV. In this study, the Zr activity was measured along two sections in Fe-Ni-Zr ternary system by chemical equilibrium technique: $x_{\text{Zr}} = 0.1$ section and $x_{\text{Zr}} = 0.15$ section, respectively. A decrease of Zr activity was found with Ni added to the Fe-Zr alloy, which may result from associates being formed between Ni-Zr. Based on the experiment data, the partial mixing enthalpy of Zr was calculated, revealing that the dissolution of Zr into the Ni-Fe mixture is an exothermic reaction, generating increasing heat with the rise in Ni content. Furthermore, the influence of the non-ideality of the mixture on the diffusion behavior in Fe-Ni-Zr solution was discussed by considering the chemical potential as the driving force for diffusion. The thermodynamic factor matrix $[\Gamma]$ defined in Maxwell-Stefan formulation was calculated along $x_{\text{Zr}} = 0.15$ section. The thermodynamic data obtained in this study provides a better understanding on the molten pool formation in the context of integral accident progression in Unit 2.