

## 談話室

スウェーデン王立工科大学での  
状態図の研究

大谷博司\*

## 1. はじめに

筆者は、昨年2月末から12月末までの約10か月間、スウェーデンのストックホルムにある王立工科大学の Mats HILLERT 教授の研究室に滞在する機会を得た。ここには、世界的な多元系状態図の計算システムである Thermo-Calc が構築されており、私もこのシステムを用いていくつか実際の合金系の状態図を計算により構成してみた。限られた紙面ではそこに含まれる膨大な内容をすべて紹介することはとても困難なので、ここでは Thermo-Calc の概要と実際に使用してみた際の体験を簡単にまとめてみようと思う。

## 2. KTH と Thermo-Calc

1827年創立の王立工科大学 (Kungliga Tekniska Högskolan, 以下 KTH と略す) は、ストックホルムの中心近くに位置し、閑静な森に囲まれた比較的小ぢまりとした大学である。しかし、大学への進学率が日本のように異常に高くないこの国にあっては、ごく限られた優秀な学生だけが学ぶことのできる理工系の最高学府であり、また学生たちもそのことを十分に自覚して勉学に励んでいる様子であった。聞くことによれば、スウェーデンにおける第一線のエンジニアや研究者の40%以上がこの大学の出身であるそうで、その伝統もなかなかのものである。

ところで HILLERT 教授の主宰する Physical Metallurgy は、KTH に設立されている10の学部のひとつ、School of Metallurgy and Materials Technology に所属し、スタッフがテクニシャンを含めて8人、大学院の学生が約10人前後の研究室である。また、そのほかに外国からの留学生も何人かおり、日本からも私のほかに、東京工業大学の梶原正憲博士が同時期に滞在されており、いろいろとお世話をいただいた。研究テーマはすべて Thermo-Calc を用いた相平衡、相変態の熱力学的な解析であり、そのために学生一人につき最低一台のコンピューター端末が与えられている。Thermo-Calc は、種々の物質の熱力学的な性質をパラメーター化したデータベースと、10元系以上の多元系状態図の計算が可能な熱力学計算プログラム、パラメーターの評価に用いられる Assessment プログラム、あるいは計算結果を自由

自在に図形表示できる Graphics プログラムなどを有機的に統合化した、熱力学計算のためのコンピューターシステムである。

このシステムを使用してみてもまず驚かされたのは、その多機能性であった。およそ物理化学における平衡計算に必要とされるほとんどすべての仕事が、コンピューターの端末から対話的に行うことができるのである。そしてまた、このシステムを構成する非常に複雑な計算原理が、既に20年以上も昔に、HILLERT 先生によって論文に発表されていることを図書室で見出した時には、驚きを通り越して感嘆してしまったことを思い出す。やはりというべきかもしれないが、この優れたシステムは、彼のような卓越した洞察力と先見性をかねそなえた指導者があってはじめて構築できたものだったのである。このささやかな“発見”は、しかし、これまでの自身の学問に対する姿勢を改めて問い直すには十分なインパクトを筆者に与えたことは確かであった。

Thermo-Calc グループのもつ現在の悩みは、やはり世界各国との連携の取りにくさという点につきるであろう。Physical Metallurgy の博士課程の学生の大半がここ10年以上の間 Thermo-Calc を使ってさまざまな合金系の熱力学的パラメーターの評価 (Assessment) を実際に行っている。しかしこれらの学生だけに頼っているのは、熱力学データベースの拡充は望むべくもないので、一方で海外の研究者に広く呼びかけて、国際的な協力の下で熱力学データの充実を図ろうともしている。そのために、各研究機関にはこの膨大なシステムを実費程度で分け与えているのであるが、学問上のオリジナリティーの問題もあるせいか、なかなか思うようには計画が進んでいないのが現状のようである。今後、この点をどのように解決していくかが Thermo-Calc のもつひとつの大きな課題であるように思われる。

3. Thermo-Calc による鉄合金状態図の  
熱力学的解析

さて、KTH において HILLERT 先生から筆者に与えられた研究テーマは、鋼中での炭窒化物の生成挙動を明らかにするための基礎研究として、Fe-N-Ti や Fe-N-V, Fe-N-Nb などの多元系に含まれる各相の熱力学パラメーターを定量的に評価し、その状態図を計算で構成するというものであった。これらは、実用鉄合金の組織制御においてきわめて重要な役割をもつ合金系であるにもかかわらず、実験データの不足などもあって、十分な解析が行われないうまま今日に至っている、いずれも手ごわい合金系であり、私自身もどこまで定量的に解析できるのか当初は全く見当がつかない状態であった。

合金状態図の熱力学的解析の第一歩は、解析に使うことのできる過去の実験データの文献調査から始まる。そこで私も、大学の文献検索データベースなどを用いなが

\* 東北大学工学部助手 工博

ら、V-N, Ti-N, Fe-N-V, Fe-N-Ti, Fe-N-Nb あるいは Ti-V-N などのような、基本となる合金系の実測データの採集にさっそくとりかかった。集める文献も、50 年も遡れば膨大になる。この文献検索だけで結局 2 か月近くかかってしまった。

文献調査が終われば、次には最もタフな仕事である、各実測データの取捨選択を行わなくてはならない。これは、個人の直感に頼らなければならない部分もあって、結果がそれぞれの研究者の知識や経験によって相当変わってくるので、責任の重い仕事でもある。筆者だけでは手に負えない場合には、HILLERT 先生とのディスカッションで問題の解決を図った。先生からは時にはかなり本質的な指摘を受け、拙い私の英語では対応しきれなくなり、冷や汗をかいたこともたびたびあった。こういう場合には、とりあえず陣容の建て直しが肝心であるので、ひとまず退散して、再度考え直し教授室を訪ねる。その繰返しが、結局滞在期間中ずっと続くことになってしまった。先生はそのたびに笑いながら “You are always quite welcome.” と言いながら相手をして下さった。

採用すべきデータが決まれば、あとはそれらをコンピューターに入力して、各合金系の熱力学パラメーターを評価すればよい。Thermo-Calc データベースには PARRÔT とよばれる強力な Assessment Program が備

わっており、パラメーターの評価の際にはこれが非常に役に立った。それでも最適化がうまく進行せず、コンピューターの端末に悪態をつかねばならぬ（時には暴力を振るわねばならない）事態はしょっちゅう起こるので、決して楽ではなかった。結局滞在期間内に Ti-N, V-N, Fe-N-Ti, Fe-N-V, Ti-C-N, V-C-N などの合金系の Assessment を終了し、その結果をデータベースに登録する手続きを取って、慌ただしく師走の日本へ帰国した。これらは個別の論文として Calphad に投稿中であるので、詳しくはそちらを参考にさせていただきたいと思う。

#### 4. おわりに

今回のスウェーデンにおける経験は、ごく短期間ではあったが私にとって研究以外の面においてもたいへん有意義であった。誌面の都合から、ここでは、Thermo-Calc の内容に詳しく立ち入って述べることができなかったが、これはまた別に発表する機会もあろうかと思うのでそちらに譲りたい。

この小文を終えるにあたり、留学の機会を与えていただき、多くの便宜を図っていただいた東北大学 西沢泰二教授と財団法人 日瑞基金の方々に、この場をお借りして厚く御礼申し上げます。