

Title	合金、セラミックス、半導体などの材料開発への熱力 学データベースの応用
Author(s)	田中, 敏宏; 原, 茂太
Citation	科学と工業. 1997, 71(1), p. 20-29
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/26443
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka



合金, セラミックス, 半導体などの材料開発への 熱力学データベースの応用

田中敏宏, 原 茂太

金属,合金,セラミックス,半導体などの熱力学量ならびに相平衡計算を主とし て行うことを目的に構築された各種熱力学データベースの紹介を行うとともに、そ の応用例として,SiO₂の炭素還元反応による高温生成物質の化学平衡計算ならび に同反応を利用したプロセスシミュレーション,合金および酸化物系の平衡状態図 計算,基板上に生成させた化合物半導体薄膜の準安定状態図計算などの結果につい て述べる。また、著者らが最近行っている熱力学データベースを利用した溶融合金 および混合溶融塩の表面張力の計算方法の概略といくつかの計算例についても紹介 する。

キーワード:熱力学データベース,平衡状態図,合金,セラミックス,半導体,表 面張力

1 はじめに

金属,合金,セラミックス,半導体などの材料工学の 分野において,これまでに種々の熱力学データベースが 構築され,これらのデータベースは主として合金や無機 化合物などの状態図の計算に用いられてきた^{1)、2)}。これ らのデータベースを構築するための熱力学データと相平 衡に関する情報の蓄積・評価・計算手法はCALPHAD (Computer Calculation of Phase Diagrams)法 と呼ばれており^{1)、2)},同法は材料工学のさまざまな分野 でその有用性が認められつつある^{1)、2)}。本稿では,上記 熱力学データベースの現況ならびにその応用計算例を紹 介するとともに,著者ら^{3)、1)}が最近行っている熱力学 データベースを利用した溶融合金および混合溶融塩の表 面張力の計算方法の概略といくつかの計算例についても 述べる。

2 熱力学データベース

本稿で扱う熱力学データベースは主として金属,合金, 酸化物などの無機化合物を対象とし,各物質の種々の熱 力学量と、相平衡関係に関する実験値を基にして、各相 におけるギブスの自由エネルギーを温度、圧力、組成の 関数として表現した際の係数をコンピュータで読み書き できるように整理・保存した情報源である。これらのデー タの規格は世界的規模でほぼ統一化されつつあるため, 平衡状態図を計算するソフトウエアや、化学平衡、局部 的化学平衡を考慮した反応容器内の物質の流れのシミュ レーションなどのプログラムを作成すれば、上記熱力学 データベースを直接利用して、各種材料の設計、物質の 合成、材料製造プロセスの検討を行うことができる。こ のような計算ソフトウェアの中には汎用性の高い優れた ものがあり、これらのソフトウェアと上記熱力学データ ベースを併せて熱力学データベースと呼ぶことも多い。 その場合には、上記熱力学データ情報源は熱力学データ バンクと呼ばれることもある。表1に金属,合金,無 機化合物に関する材料工学の分野で用いられている主な 熱力学データベースを示す^{2).5~14)}。各データベースの内 容,問い合わせ先などの詳細については文献^{2),5~9),14)} をご参照いただきたい。 これらの中で SGTE (Scientific Group of Thermodata Europe) 熱力学データ

Application of Thermodynamic Databases to Design of Alloys, Ceramics and Semi-conductors. Toshihiro TANAKA 大阪大学工学部材料開発工学科 助教授 工学博士 (〒565 吹田市山田丘 2-1) Shigeta HARA 大阪大学工学部材料開発工学科 教 授 工学博士

名称	開発国		参考文献
SGTE	(ヨーロッパ4カ国)	7研究所が共同でデータを管理し,熱力学データ バンクを運営している。	2), 5), 6), 7), 8), 9), 14)
Thermo – Calc	(スエーデン)	SGTE データベースも利用。合金状態図の分野 で特に広く利用されている。鉄合金,化合物半導 体などの独自のデータベースも有している。	2), 5), 6), 7), 8), 9)
Therdas/ChemSage	(ドイツ)	SGTE データベースを利用。ChemSage という 応用熱力学計算ソフトウエアのみの入手も可能。	2), 5), 6), 7), 9), 10), 13)
FACT	(カナダ)	インターネットでの利用も可能(ただし、一部 の機能は利用できない)。相平衡計算には Chem	2), 5), 6), 7), 8), 9)
(http://www.crct.polymtl.ca/FACT/fact.htm)		Sage が組み込まれている。	
MTDATA	(英国)	SGTE データベースのグループのひとつ。	2), 5), 8)
THRMODATA	(フランス)	SGTE データベースのグループのひとつ。文献 情報データベースを有している。	2), 5), 8)
ASM	(米国)	合金状態図を主体とするデータベース	7), 9)
Manlab	(米国)	合金状態図を主体とするデータベース	2), 5)
MALT 2	(日本)	純粋物質中心でJANAF型の熱力学表の計算が可 能。データ数はSGTE 並の規模である。 化学ポテンシャル図作成ツールもオプションで接 続可。	5), 6), 7), 9) 11), 12)

表1 金属, 合金, 無機化合物を対象とする主な熱力学データベース

65.31

ベースはヨーロッパの4か国7研究所が合同で作成して いるデータベースで、各研究所が自らの得意分野を中心 として応用ソフトウェアを作成し、データについては SGTEのデータベースを共同で利用するという形態を とっている¹⁴⁾。また、MALT2は日本の国産の熱力学 データベースである^{11, 12)}。

3 熱力学データベースを用いた応用計算例

ー本節では上記熱力学データベースの応用計算例を紹介 する。

1 SiO₂の炭素(C)による還元反応の検討(種々の温度における反応生成物の計算)

まず最初に、1 atm のもとで SiO₂ 1 モルと C 2 モ ルを混合して常温から昇温し、1600℃~3000℃の温度域 で還元反応により Si を得るプロセスに対して、どのよ うな反応生成物が各温度で存在するかを検討する例を考 える。例えば ChemSage というソフトウェア^{6), 10), 13)} を利用して SGTE の データベースを用いる場合には 表 2 のような手順で計算を行う。2000℃における計算 結果を 表 3 に示す^{6), 10), 13)}。また、全温度域に対する 各種反応生成物の生成量の計算結果を 図 1 に示す⁶⁾。 表 3 の下欄には表の上方に示された反応温度に対する 反応熱、反応の自由エネルギー変化などの計算結果も表

- 表2 ChemSageによるSiO₂の炭素(C)による 還元反応生成物の計算手順
- SGTE データベースから Si, O, C に関する熱力
 学データの抽出ならびに Si, C, O に関するデー
 タファイルの作成
- (2) ChemSage への上記データファイルの読み込み
- (3) ChemSage 内の相平衡計算モジュールへの移行
- (4) 温度, 圧力の単位の設定
- (5) 組成の入力 (SiO₂ 1モル, C2モル)
- (6)温度,圧力の設定
- (7) RUN
- (8)結果の表の表示
- (9) 結果の図の作成と表示

示されている。

 CO と O₂ ガスの高温における断熱反応(反 応熱を制御した計算)

反応熱を制御した化学平衡も計算できる。例えば、 298.15 K,全圧 1 bar で CO ガス 1 モルと O₂ ガス 1 モ ルを混合し、全圧を 1 bar に保ったまま昇温する例を考 える。その際、断熱反応の条件下では何度で平衡状態に 達し、ガスの組成はどのようになるかを知りたい場合に は、表 4 のような手順で先の ChemSage というソフ

- 22 -

表3 SiO₂のCによる還元反応の2000℃における計算条件と反応生成物,反応熱などの計算結果^{(), 13}

T = 2000.00 C ◀		- 反応温度						
P = 1.00000 E + 00	atm 🗲 🗕	- 反応圧力						
V = 3.7322 E + 02	2 dm ³							
REACTANTS:	2 0000	$F \pm 00$	LEMPE	RATURE/C	PR.	ESSURE/atm) EP	如烟タ母
SiO ₂ (quartz)	1 0000	E + 00 E + 00	2	5.00	1.0	1000 E + 00	风心	初期余件
					1.\]]	
	E	EQUIL AMOU	INT N	IOLE FRAC	ΓION	FUGACITY		
PHASE: GAS)		mol)	Ì		atm)	
СО	気	1.5004 E + 00	物気	$7.4988 \mathrm{E} - 01$	物気	$7.4988 \mathrm{E} - 01$		
SiO	伯	$4.9953 \mathrm{E} - 01$	質相	2.4966E-01	質相	$2.4966 \mathrm{E} - 01$	気相中	の各生成物質
Si	, o	8.1048E-04	しその	$4.0507 \mathrm{E} - 04$	しての	$4.0507 \mathrm{E} - 04$	07-	ーガシティ
Si₂C	生	5.8837 E - 05	レ各数な	2.9406 E - 05	ル各	$2.9406 \mathrm{E} - 05$	(理想気	〔体の場合,分
CO 2	物	$4.2084 \mathrm{E} - 05$	一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一一	2.1033 ± 05	邓 武	$2.1033 \mathrm{E} - 05$	圧と同	じ)
(中略)	質	(中略)		(中略)		(中略)		
TOTAL:		2.0008 ± 00	J	1.0000E+00 J		1.000 ± 00	J	
) #-	mol)			ACTIVITY) これらの	D実際には存在
SiC	一生成	$4.9952 \mathrm{E} - 01$				1.0000 ± 00	しない	戎分 (EQUIL
Si	物	0.0000 E + 00	0:0 0	7. 440 5 1		$5.7698 \mathrm{E} - 01$	AMOUI	NT が 0) の活
С	質	0.0000 ± 00		の約0.5 mol		2.1450 ± -01	「童値にに	は物質的意味は
SiO₂ (liguid)	凝	0.0000 ± 00	一元して	いる		1.3611E - 02		「温度・圧力」
SiO₂ (cristobali)	縮	$0.0000 \mathrm{E} + 00$	1,000	• •		1.2686 E - 02	などの多	条件が変化した
SiO₂ (tridymite)	相	0.0000 ± 00				1.2506E - 02	際, 生质	戈する可能性の
SiO₂ (quartz)	J	0.0000 ± 00	J			1.1045 ± -02	∫ 高いこと	を示している
JELIAN	JELIA 5	DELIA (J DE	LIAU L	ELTA T	A DEL'I	A V	例題の反応
8.4100E+05 $5.4568E+02$ $-5.0376E+05$ $8.0318E+05$ $-5.4157E+05$ $3.7322E+02$								
√ 反応熱が約8.4×10 ⁵ J である								
ことが示されている								
One-dimensional phase ma	p for system co	mposition: SiO ₂ + 2	c	表4 Ch	nemSag	ge による CO	とO2ガス	、の高温におけ



- る断熱反応(反応熱を制御した計算)の計算手順
- (1) ChemSage への Si, O, C に関するデータファ イル読み込み
- (2) ChemSage 内の相平衡計算モジュールへの移行
- (3) 温度, 圧力の単位の設定
- (4) 組成の入力 (O₂ 1モル, CO 1モル)
- (5) 圧力の入力
- (6) 温度が未知数であることの入力(*を入力)
- (7)反応熱が0であることの入力
- (8) RUN
- (9)結果の表の表示

T = 2871.81 K			
P = 1.0000E + 00	BAR		
V = 3.9743E + 02	DM 3		
5) (¹			
REACTANTS :	AMOUNT/MOL	TEMPERATURE/K	PRESSURE/BAR
CO/GAS/	$1.0000 \mathrm{E} + 00$	298.15	1.0000 E + 00
O2/GAS/	$1.0000 \mathrm{E} + 00$	298.15	$1.0000 \mathrm{E} + 00$
	EQUIL AMOUNT	PRESSURE	FUGACITY
PHASE: GAS	MOL	BAR	BAR
CO2	$7.4277 \mathrm{E} - 01$	$4.4625 \mathrm{E} - 01$	4.4625 E - 01
. O 2	$5.9278 \mathrm{E} - 01$	$3.5614 \mathrm{E} - 01$	$3.5614 \mathrm{E} - 01$
CO	$2.5724 \mathrm{E} - 01$	$1.5455 \mathrm{E} - 01$	1.5455 E - 01
0	7.1668 ± -02	4.3058 E - 02	4.3058 E - 02
Õ3	$2.7112 \mathrm{E} - 07$	$1.6289 \mathrm{E} - 07$	1.6289 E - 07
C	$1.9014 \mathrm{E} - 12$	$1.1424 \mathrm{E} - 12$	$1.1424 \mathrm{E} - 12$
C ₂	$7.4851 \mathrm{E} - 20$	4.4970 E - 20	4.4970 E - 20
C ₃	$3.4990 \mathrm{E} - 26$	2.1022 E - 26	2.1022 E - 26
TOTAL :	$1.6645 \mathrm{E} + 00$	1.0000 E + 00	
	MOL		ACTIVITY
C	$0.0000 \mathrm{E} + 00$		8.0155 E - 08
****	*****	****	*****
DELTA H/J I	DELTA S/J.K-1 DELTA G	/J DELTA U/J DEL	TA A/J DELTA V/DM3

.







トウェアを操作し,表5の結果が得られる¹³⁰。同表の 下欄に示すように反応熱は0になっており,その際の反 応温度は2871.81 K であることがわかる。



図2(b) SiO₂のCによる還元反応炉内の反応生成 物の計算結果^{10), 13, 15)}

 3.3 SiO₂の炭素(C)による還元反応プロセスシ ミュレーション(反応器内定常状態計算)

次のような反応器内の定常状態のシミュレーションも 可能である。図2(a)に示す縦型反応器の上部より

SiO₂ と C を 1:2 のモル比で投入し,反応器下部に 875 kJ のエネルギーを加えた場合,反応器下部から Si が 生成するかどうかについて検討する^{10),13),15)}。ただし,反 応中に生成したガスは反応器の下から上方向に移動し, また凝縮物質は上から下方向に移動する。また反応器を 通しての熱の出入りは上記投入エネルギー以外はないも のとする(すなわち断熱反応)。結果を 図 2 (b)に示 す^{10),13),15)}。この例の場合反応器を同図に示すように4 分割し,各部内では熱力学的平衡状態が成り立っている と考え,各物質がそれぞれ固有の割合で隣の分割部へ移 動すると考えている。各分割部の温度が 図 2 (b) に示



図3 Pb-Sn 2 元系平衡状態図の計算結果と 実験結果の比較ⁱ⁶

すように計算され、上記エネルギー投入量に対して炉下 部より Si が得られることがわかる^{10). 13). 15)}。

3.4 平衡状態図の計算

図 3 は Pb-Sn 2 元系平衡状態図の計算結果を示 し¹⁰, また, 図 4 (a), 図 4 (b) は鉄鋼プロセスにお ける溶融スラグに関係する CaO-SiO₂-Al₂O₃ 3 元系 の液相面温度の計算結果と実験結果を比較したものであ る⁵¹。特に液相面の谷の部分を太線で示したが, 両者の 形状の一致の具合がよくわかる。さらに, 系の構成成分 の化学ポテンシャルを縦軸, 横軸にとって化学ポテンシャ ル図を作成することも可能である。図 5 はその一例で, 横川らが燃料電池の電解質のセパレータ材料を選択する 際の情報として, 広範囲の酸素ポテンシャルに対して安 定な希土類複合酸化物の存在領域を検討するために作成 したものである^{15,17}。同図から LaCrO₂ が広い酸素ポ テンシャルに対して安定な酸化物であることがわかる。

3.5 準安定平衡状態図の計算

熱力学データから相平衡関係を計算する原理を 図 6 に示す。各相の自由エネルギーの組成関数である曲線に 共通接線を描くことによって、その接点から相境界が決 まる¹⁸⁾。この際特定の相の自由エネルギー曲線を意識的 に無視すれば、上記平衡状態図計算の手法は 図 7 に示 すように、準安定相平衡関係の検討にも利用できる¹⁸⁾。 また Kobayashi らは、化合物半導体基板上に別の化 合物半導体の薄膜を生成させる場合に、基板と生成膜 間に生ずる機械的歪の影響を機械的なエネルギーとして



図4 (a) CaO-SiO₂-Al₂O₃3元系の液相面の計算結果⁶⁾



図4 (b) CaO-SiO₂-Al₂O₃3元系の液相面の実験結果⁶⁾



図 5 ランタン - 遷移金属 - 酸素系の化学 ポテンシャル図^{15,17}



図6 自由エネルギー曲線と平衡状態図の関係18)

自由エネルギーの中に考慮することにより, 薄膜物質 の状態図を計算している¹⁹⁾。図 8 (a) から (d) にそ の結果を示す¹⁹⁾。同図中の (a), (b) は GaAs 基板上 に GaAs – GaSb の薄膜を析出させる場合で, 基板と の歪も小さいため, バルク物質と薄膜の状態図には大 きな差はない。しかしながら, 図 8 (c), (d) の場合



GaAs(100)基板上に生成した GaAs-GaSb 薄膜の計算状態図

GaAs-GaSb 薄膜の計算状態図



には, InP 基板に GaAs-GaSb 薄膜を生成させたた め歪が大きく,中間組成域でバルク物質には存在しない 化合物相の現われることが計算から明らかとなり, Qui llec ら²⁰⁾の実験結果とも対応している。

4 熱力学データベースを利用した溶液の表面 張力の計算

前節までで紹介した熱力学データベースを相平衡関係

の計算のみならず多成分系融体の物性値の評価にも利用 することができれば、熱力学データベースの有用性をさ らに高めることができるだけでなく、多成分系融体の物 性の理解のためにもきわめて有効であろう。 著者 ら^{33,0} は最近このような観点から熱力学データベース を利用して、実験的情報が少ない液体合金や混合溶融塩 の表面張力の計算を試みており、本節ではその手法と計 算例を紹介する。

4.1 A-B2元系溶体の表面張力に体する Butler の式

熱力学データを利用した溶体の表面張力の計算は,例 えば次のグループで行われてきた。

- 1) Hoar · Melford²¹⁾; 2) 門間 · 須藤^{22), 23)};
- 3) 笠間ら^{24~26)}; 4) Speiser ら^{27), 28)}

※上記のグループは液体2元系合金に対して表面張力の 計算を行っており、いずれのグループも Butler の式²⁰⁾ を利用している。A−B2元系溶体の表面張力σに対す るButler の式は次のように表わされる。

$$\sigma = \sigma_{A} + \frac{RT}{A_{A}} \ln \frac{(1 - N_{B}^{S})}{(1 - N_{B}^{B})} + \frac{1}{A_{A}} \overline{G}_{A}^{E, S} (T, N_{B}^{S})$$
$$- \frac{1}{A_{A}} \overline{G}_{A}^{E, B} (T, N_{B}^{B})$$
$$= \sigma_{B} + \frac{RT}{A_{B}} \ln \frac{N_{B}^{S}}{N_{B}^{B}} + \frac{1}{A_{B}} \overline{G}_{B}^{E, S} (T, N_{B}^{S})$$
$$- \frac{1}{A_{B}} \overline{G}_{B}^{E, B} (T, N_{B}^{B}) \qquad (1)$$

ここで、Rはガス定数、Tは温度、 σ_x は純液体成分 X の表面張力、 A_x は純液体成分 X のモル表面積であり次 式から計算できる(X=A or B)。

$$A_{\rm X} = L N_0^{1/3} V_{\rm X}^{2/3} \tag{2}$$

 N_{o} はアボガドロ数, V_{x} は純液体 X のモル体積である。 L は液体金属に対しては最密充填を仮定して1.091とい う値が使われ、イオン性融体に対しては近似的に L=1とする。Butler は式 1 をバルク相と仮想的な単原子 層の"表面相"との熱力学的平衡関係から導出した²⁹。 $\overline{G}_{x}^{E,S}(T, N_{B}^{S})$ は表面相における成分 X の部分モル 過剰自由エネルギーで,括弧内の温度 $T \ge B$ 成分の 表面相におけるモル分率 N_{B}^{S} の関数である。また $\overline{G}_{x}^{E,B}(T, N_{B}^{B})$ はバルク相における成分 X の部分モル 過剰自由エネルギーで,温度 $T \ge B$ 成分のバルク相に おけるモル分率 N_{B}^{B} の関数である(X=A or B)。

1)4.2 バルク相と表面相の過剰自由エネルギーの関 (例)1000 係

電式1 においてバルク相に対する $\overline{G_{x}}^{EB}(T, N_{B}^{B})$ は

熱力学データベースから直接得られるので、表面相にお ける $\overline{G_{X}}^{E,S}(T, N_{B}^{S})$ の情報が必要となる。Speiser ら^{27), 28)}, Hoar・Melford²¹⁾, 門間・須藤^{22), 23)}, 笠間 ら^{24~25)}は $\overline{G_{X}}^{E,S}(T, N_{B}^{S})$ に対する彼等独自のモデルを 導出し、それらのモデルをまとめると次のように表現で きる。

$$\overline{G}_{X}^{E,S}(T, N_{B}^{S}) = \beta \cdot \overline{G}_{X}^{E,B}(T, N_{B}^{S})$$
(3)

ここで、式3は $\overline{G_x}^{E,s}(T, N_B^s)$ が $\overline{G_x}^{E,B}(T, N_B^b)$ と 同じ関数形を有しているが、 N_B^B が N_B^s で置き換えら れ、さらにβが掛けられていることを示している(X= A or B)。βは表面相とバルク相における配位数Zの比 Z^s/Z^b に対応するパラメーターである。例えば、Speiser ら^{27), 28)}は過剰自由エネルギーが配位数に比例すると仮 定し、表面相ではバルク相における原子に比べて最近接 原子との結合が Z^s/Z^b の比に相当する原子数だけ減少 するため、最密充填を仮定して $\beta = Z^s/Z^b = 9/12$ と考 えている。しかしながら、 β の値は例えば表面相におけ る結合エネルギーの変化や原子再配列など、 Z^s/Z^b 以 外の因子の影響を受けると考えられる。さらにイオン性 融体に対しては Z^s/Z^b に関する情報は得られていない。 そこで、著者らは門間、須藤^{22), 30)}の提案した考え方を 利用して、次のような β の値を得た⁴⁾。

> β=0.94:混合溶融塩,混合溶融酸化物 (5)

4.3 溶体の表面張力の計算手順

溶体の表面張力のは次の手順で計算できる。

- 1) 温度 T と溶体の濃度 N_B^B を設定する。
- 2)上記の温度に対する純成分の表面張力とモル体積の データを式 1, 2 に代入する。
- 1 上記の温度,濃度に対するバルク相の部分モル過剰
 自由エネルギーを熱力学データベースから求め,式
 1 に代入する。
- 4) これより 式 1 は $N_{\rm B}^{\ \rm s}$ を未知数とする方程式にな る。そこで、式 1 を数値解析により解いて $N_{\rm B}^{\ \rm s}$ を 求め、再度、得られた $N_{\rm B}^{\ \rm s}$ の値を式1に代入するこ とによって溶体の表面張力 σ の値を求める。
 - 4.4 溶融合金,混合溶融塩の表面張力の計算に対 する熱力学データベースの応用

まず計算例として,溶融 Fe-Si,Cu-Pb 合金に対 する表面張力の計算結果⁽⁾を図9,図10に示す。過剰 自由エネルギーのデータはSGTEのデータベースから 引用した。同図に示すように,計算結果は実験結果^{31~55)} と良い一致を示すことがわかる。

また Pelton³⁶⁾ は CALPHAD 法により混合塩の状態 図計算用熱力学データベースを構築しており, 同データ







図10 溶融 Cu-Pb2元系の表面張力の計算結果と 実験結果の比較⁴⁾



図11 混合溶融塩の表面張力の計算結果と実験結果の比較¹⁾

ベースを用いた混合溶融塩の表面張力の計算結果^いと NIST の溶融塩データベース³⁷に保存されている実験結 果との比較を図11に示す。

5 おわりに

本稿では,金属,合金,無機化合物などの相平衡計算 を主として行うことを目的に構築された各種熱力学デー

タベースとその応用計算例,ならびに著者らが最近行っ ている熱力学データベースを利用した溶融合金、混合溶 融塩の表面張力の計算例を示した。熱力学データベース は材料開発の実務作業に応用できる段階にまで達しつつ あるが、1)計算の元になるデータの標準化、2)推奨 値の評価方法の検討, 3) データがない場合の推算方法 の検討,4)新たなデータを蓄積するための測定値供給 源の確保などの問題が残されており,これらの問題点に ついては,著者らの解説記事^{5), 15)} をご参照いただきた い。現在、著者らは本稿で述べた表面張力などの物性値 計算への熱力学データベースの応用手法と熱力学データ ベースの推算機能を付加した多機能熱力学データバンク システムを構築する計画を進めている。このシステムで は多成分系融体の物性値と相平衡関係を同時計算により 評価し、材料開発・材料プロセス設計に必要なデータを 提供するとともに複数の物性値を同時に評価し、目的と まる機能を有する材料の最適な元素の組み合わせと組成 域を推算することにより材料開発を効率的に進めること を目指している。

(平成8年9月17日受理)

文 献

- 1)西沢泰二,日本金属学会会報,31,389(1992)
- 2) C. W. Bale, G. Eriksson, *Can. Matall, Quar.*, 238829, 105 (1990)
- 3) T. Tanaka, T. Iida, Steel Research, 65, 21
- 4) T. Tanaka, K. Hack, T. Iida, S. Hara, Z. Mc Metallkunde, 87, 380 (1996)
- 5) 田中敏宏,飯田孝道,日本金属学会会報, 32, 535 ◎ 葉 (1993)
- 6)山田 亘 "材料開発・設計における状態図の基礎と
- う○応用"(セミナーテキスト), p.93,(1994, 日本金 ◎◇同学会)
- 年)石田清仁,大谷博司,西沢泰二"新熱測定の進歩" 豪華日本熱測定学会編集,p.50(1990,リアライズ社)
- 8) C. W. Bale, G. A. Iron, Proc, 2nd Intern,
 Symp. on Computer Software in Chemical
- and Extractive Metallurgy, Quebec. (1993)
- 9)日本金属学会シンポジウム予稿集 "材料化学におけるデータベース利用の現状と問題点:データベー
- 🔹 🔍 ス入門と製錬・凝固プロセスへの利用"(1993)
- 10) G. Eriksson, K. Hack, *Metall. Trans. B.*, 21B, ~ 1013 (1990)
- 11) 山内 繁, 熱測定, 12, 142 (1985)
- 12) 横川晴美, 熱測定, 23, 70 (1996)
- 13) 田中敏宏, 飯田孝道, 熱測定, 18, 174 (1991)

- 29 —
- 14) I. Ansara, B. Sundman "Computer Handling and Dissemination of Data" ed. by P. S. Glaeser, p154 (1987, Elsevier Sci. Pub, North - Holland)
- 15)田中敏宏,原 茂太 "素材プロセス研究:希少金属 素材の再資源化"「金属」臨時増刊号,p.147 (1996, アグネ)
- 16) T. L. Ngai, Y. A. Chang, CALPHAD, 5, 267 (1981)
- 17) 横川晴美, 化学工学, 54, 736 (1990)
- 18) 西沢泰二 "状態図の基礎から応用まで"(セミナー テキスト) p.19 (1987, 日本金属学会)
- K. Kobayashi, H. Ohtani, K. Ishida, Proc. the 14th Electronic Materials Symp., p.141 (1995)
- M. Quillec, H. Launois, M. C. Joncour, J. Vac. Sci. Technol., B1 (2), 238, (1983)
- 21) T. P. Hoar, D. A. Melford, Trans. Faraday Soc., 53, 315 (1957)
- 22) 門間改三, 須藤一, 日本金属学会誌, 24, 65 (1960)
- 23) 門間改三, 須藤一, 日本金属学会誌, 25, 143 (1961)
- 24) 笠間昭夫,乾隆信,森田善一郎,日本金属学会春期 講演概要,p.203 (1977)
- 25) 笠間昭夫, 大阪大学博士学位論文, p.113 (1978)
- 26) 森田善一郎, 笠間昭夫, 田中 仁, 乾隆 信, 日本 金属学会春期講演概要, p.148 (1978)
- 27) R. Speiser, D. R. Poirier, K. Yeum, Scripta Metall., 21, 687 (1987)
- 28) K. S. Yeum, R. Speiser, D. R. Poirier, *Metall. Trans.*, B. 20B, 693 (1989)
- 29) J. A. V. Butler, Proc. Roy. Soc. A. 135, 348 (1932)
- 30) 門間改三, 須藤 一, 日本金属学会誌, 24, 117 (1960)
- 31) G. Metzger, Z. Phys. Chem., 211, 1 (1959)
- 32) J. C. Joud, N. Eustathopoulos, A. Bricard,
 P. Desre, J. Chim. Phys., 70, 1290 (1973)
- 33) N. K. Dzhemilev, S. I. Popel, B. V. Tsarevskii: Fiz., Metall. i Metalloved., 18 (1), 83 (1964)
- 34) L. M. Shergin, S. I. Popel, B. V. Tsarevskii: [in:] Fiz., "khim. poverkl. yavlenii rasp." ed. V. N. Eremenko, p.161; (1971, Kiev, Naukova Dumka)
- 35)川合保治,森 克巳,岸本 誠,石倉勝彦,下田俊郎:鉄と鋼,60,29(1974)
- 36) A. D. Pelton, CALPHAD, 12, 127 (1988)
- 37) NIST molten salt database (1987, National Institute of Standards and Technology)