

CALPHAD XXXVIII 会議報告

CALPHAD XXXVIII conference report

阿部太一

物質・材料研究機構、計算科学センター、粒子・統計熱力学グループ

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2628, FAX: 029-859-2601, E-mail: abe.taichi@nims.go.jp

## はじめに

筆者が CALPHAD(CALculation of PHase Diagrams) 会議に始めて参加したのは、1995 年に京都で開かれた第 24 回で、そしてその次に参加したのはそれから 10 年経った 2005 年(マーストリヒト、オランダ)であった。筆者が状態図に関する研究を本格的に始めたのは 2003 年ごろからであり、この分野の歴史や参加者の顔ぶれを見るとまだまだ新参者で、最初はこの会議報告を書かせていただくのは躊躇したが、開き直って、私自身の勉強のためにも、既出のいろいろな文献を頼りにこれまでの CALPHAD 会議の歴史を若干ではあるが振り返りながら、レポートしてみようと思う。そういう訳なので、ここに書かれている記述はもしかしたらあやしいぞと思いつつ読んでいただければ幸いである。特に、もしこの会議報告を読んで興味や疑問が沸いたら、ぜひご自身でそれを確認する意味でも実際の会議に参加してその雰囲気を感じていただけないかと、さらに開き直っていたりもする。

今回の特集号では、材料(工学)研究におけるフェーズフィールド法などの動的シミュレーション手法や第一原理計算の役割とその進展にスポットを当てている。CALPHAD 法は多岐にわたる熱力学データ、結晶学データ、力学データを解析(熱力学アセスメントと呼ぶ)し、物質の自由エネルギーを与える手法であり、これまで計算科学分野において重要な役割を果たしてきた。その出発点は、状態図を計算で求めようとする取り組みであったが、現在では状態図を計算するためだけにとどまらず、前述の様に

多くのシミュレーションの基礎データとなる自由エネルギーを与える手法として、その存在意義と重用性は急速に高まっている。もし、この会議報告からこの CALPHAD 法の進展の一端をお感じ頂くことができたならば幸いである。

## CALPHAD 会議

熱力学、状態図に関する会議はいくつもあるが、その中で 36 年という歴史を持つ CALPHAD 会議は歴史の長い会議といっても良いだろう。同様の分野の関連する会議と比べると、たとえば PTM(Solid-Solid Phase Transformation)は 1981 年から、TOFA(Discussion meeting on thermodynamics of alloys)や HTMC(High temperature materials chemistry)は 1990 年代からである。CALPHAD 会議は、主に状態図計算に関する会議であり、1973 年の第一回から数えて今回のプラハでの会議は第 38 回目にあたる。この第一回の様子は、Brief history of CALPHAD<sup>1)</sup>に詳しく述べられており、ここでその様子を少し取り上げてみよう。文献<sup>1)</sup>によると、第一回の CALPHAD 会議は、Kaufman 教授の呼びかけにより、ケンブリッジ(アメリカ)において開かれ、そこには 13 名が集まったと書かれている。その時の参加メンバーは以下の通りである。

Larry Kaufman, Ibrahim Ansara, Claude Bernard, Oswald Kubaschewski, Ihsan Barin, Philip Spencer ([1]の著者), Jack Counsell, Mats Hillert, Gernot Kirchner, Harvey Nesor, John Cahn, Dick Weiss, Claude Lupis

この中で Kaufman 教授と共に CALPHAD の立ち上げに尽力された Ansara 教授は 2001 年に

他界されている。第一回の会議においては Lattice stability、磁気変態モデル、二元系と三元系の計算状態図、二元系のパラメーターの三元系への拡張などが議論されたと書かれており、これらは現在でも CALPHAD 法の基礎となっている。そして、議論に集中するため会議は、窓のない部屋で行われ、大変刺激的であったが疲労困憊した、議論を妨げないように昼食には弁当が用意されたと書かれている。国際会議に参加して、議論しすぎてくたくたになるなんていう経験は、少なくとも私は持っていない。当時の CALPHAD では参加者が計算状態図に関してどれだけ濃密な時間を共有できたことだろうと思いを馳せるとうらやましく思えてくる。

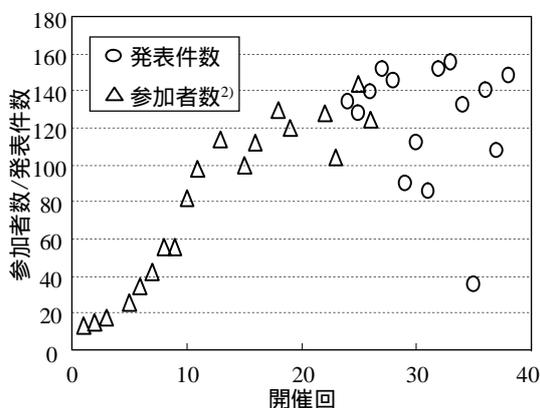


図1 CALPHAD会議の参加者数の推移。第26回以降は参加者数データが無いので総発表件数をプロットしてある。

図1は会議参加者数（後半は口頭+ポスター講演の数）の推移<sup>2)</sup>であるが、初期の会議では、参加者の数が限られていることから、主にコアメンバーを中心とした枠組み作りが中心であったのかもしれない。その当時の様子の一部は書籍<sup>2)</sup>に書かれている。そしてCALPHADは、現在では百数十名の参加者を集める会議になっているが、しかし、今もその当時からの伝統は十分感じることができるのではないと思う。というのは、窓のない部屋とまではゆかないが、多くの場合 CALPHAD 会議は市の中心部ではなく周りに何も無い場所、会議に参加する以外周りに何もアトラクションがない(少ない)場所で開かれることが多い。そしてほとんどの参加者は同じホテルに泊まり、朝、昼、晩とホテル

のレストランで一緒に食事を取る(参加費に食事代が含まれており、ミールクーポンが配られる)。会議場も同じホテル内にあるので、参加期間中は、毎日同じメンバーと常に顔を合わせていることになる。小さい規模の研究会であればこのような進め方は可能かもしれないが、ある程度の大きさの会議、特に近年の大型の国際会議では、自分の義務を果たすと(関連するセッションへの参加や自身の発表が終わると)会議場を後にする参加者も多いように思う。この点で CALPHAD 会議は特別なのではないかと思う。

それではもう少し筆者が感じている CALPHAD 会議の特徴的なことを挙げてみよう。まずは Single session policy であろう。ある程度の規模の会議になると、研究発表は同時に複数の会議場 (Parallel session) で進められていることが多いが、CALPHAD 会議では会議場は1つだけで行われることが多い(まれにパラレルになることもある)。これは会議参加者全員が同じ部屋に集まり同じ講演を聴くためである。これも窓のない部屋で喧々諤々の議論を交わしたという第一回の会議を連想させる。図2に講演件数の内訳を示すが、Single session のため口頭発表件数がどの回もほぼ同じになっている(溢れてしまった分はポスター発表に繰り入れられているようである。発表件数の多いポーランド、カナダの回はパラレルセッションで行われた)。

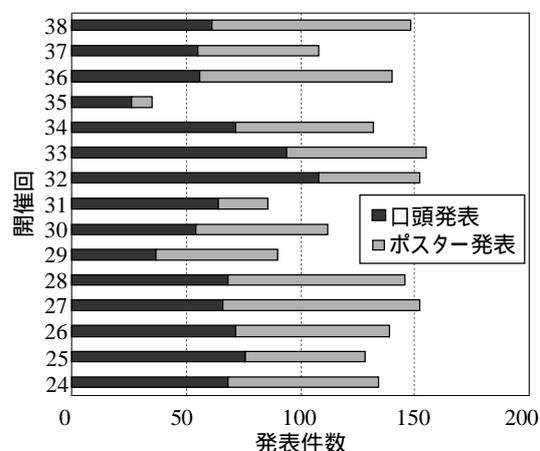


図2 第24回から今年(第38回)までの発表件数の推移。口頭発表件数は約70件で一定。黒:口頭発表、グレー:ポスター発表

もう一点は、Accompanying parsons program (会議参加者の同伴者用のプログラム)である。会

議の開催場所が町から離れていることが多いので、会議参加者が会議に出席している間、同伴者はそのままでは間違いなく暇である。そのため、ほぼ毎日、同伴者のための観光プログラムが用意されており、中には個人ではなかなか見学できないような場所も含まれている。そのためかどうかはわからないが、CALPHAD 会議では同伴者の参加が多いようで、大体参加者の1割程度がご夫婦で参加されている。そして参加しているメンバーはいつも大体同じなので、会議で発表する研究者だけでなく、同伴者同士も顔見知りで仲が良いようである。そして新しく CALPHAD 会議に参加した若い研究者 (Young Calphadian) に対しては、会議の二日目の夕食後ぐらいに、毎回ではないが親睦会 (Young Calphadian conference) が開かれる。Conference とは言うがもちろん飲み物が振舞われる。ここでは、若い研究者だけではなく重鎮の先生方も (私が見る限りかなりよるこんで、会議のときよりも生き生きとして) 参加して親睦を深めている。ここで Kaufman 教授がいつもいうのは、「CALPHAD は家族である。CALPHAD Family へようこそ」ということである。こういったある意味濃密な関係が CALPHAD 会議の特徴なのではないかと思う。もちろん、CALPHAD コミュニティ内でどのようなかわり方をするかというのは、参加者によってさまざまであるが。

この節の最後に 1973 年の第一回 CALPHAD 会議における、Kaufman 教授と Ansara 教授の言葉を引用しておこう。これは参考書籍<sup>2)</sup>や CALPHAD のウェブサイト<sup>3)</sup>に掲載されているもので、今でも CALPHAD の基本コンセプトになっている (拙訳は筆者による)。

We are present all using different computer methods to obtain tie-line solutions. We are also using slightly different formulations for the excess Gibbs energy of solution. In some cases the differences may be more semantic than real, but in any case, if we can all employ equivalent computer programs, we could concentrate on the problem of defining

system parameters in order to achieve universal interchangeability of results. We believe that substantial progress can be made in a short period of time if we could arrange to work together for one week at one of our facilities to define problems, disband, carry out some individual activities, and meet again for a week at a second facility to compare results and chart future activities.

-----Kaufman and Ansara, 1973

現在、我々がタイラインを求めるために用いている計算手法はお互いに異なっており、また、溶体の過剰ギブスエネルギーの形式も若干異なっている。異なる意味がある場合もあるかもしれないが、しかし、そうであったとしても、もし我々全員が同じ計算プログラムを用いることができれば、結果の普遍的な互換性が得られるように定義された系のパラメーターの問題にのみ集中できるだろう。問題点を明らかにするために一堂に集まり、一週間議論を交わし、その後自分の研究所へ戻り各々の研究を進め、そして再び集まり、お互いの結果を持ち寄り、相互に比較し、これからの研究方針を考える。もしそれができるのであれば、短期間で大きな進歩が得られると我々は確信している。

-----Kaufman and Ansara, 1973

### 会議のトピックス

今年開かれた第 38 回 (2009 年、プラハ) の CALPHAD 会議のトピックスは次のようになっている。

The CALPHAD XXXVIII (2009 in Prague)

- *Ab initio* (first principles) calculations
- Metallic systems
- Non-metallic systems
- Amorphous materials
- Nano systems
- Software and database development
- Industrial applications
- Integration of CALPHAD modeling and phase-field simulations

- Modeling of diffusion and phase transformation
- Coupling of thermodynamic and material properties modeling

CALPHAD ホームページから手に入る最も古い CALPHAD 会議の概要集は第 28 回 (1999 年、グルノーブル、フランス) であるが、その時のトピックスを見ても上記とほぼ同じである。ただし、その中身には大きな違いがある。それは第一原理計算の援用である。第一原理計算に関する発表は、講演タイトルから判断できるものだけではあるが、第 28 回では初日の 2 セッションのみで 8 件 (口頭発表 70 件中)、これが今年の CALPHAD 会議では、ざっと見たところ 30 ~ 40 件になる (口頭発表 67 件中)、実際に講演を聞いた感覚では、ほとんどの講演で何らかの形で第一原理手法を用いた熱力学量の推定がなされており、これまでの主流であった実験だけの講演数はかなり限られていた。すなわち、この約 10 年の間に、この分野において実験手法と第一原理手法の併用や熱力学アセスメントにおける第一原理計算の援用が急速に進んでいることを意味している。すなわち第一原理計算の専門家ではない研究者もその手法を積極的に取り入れていることを示しており、それ自体はすばらしいことである。しかし、計算科学的手法には適用できる範囲を理解しておくことも重要であり、その専門家でないと判断が難しいことも多い (小林氏の解説参照<sup>4)</sup>)、これが今後の課題になるのかもしれない。

### 表彰各種

CALPHAD 会議では、バンケット (夕食会) において以下の表彰を行っている。受賞者リストはホームページ<sup>4)</sup>に掲載されている。

- Best paper award  
年間の最優秀論文に贈られる。ホームページによると 500USD が贈られるとのこと。
- Best poster award  
CALPHAD 会議でのベストポスターに与えられる。口頭発表件数が限られているので (Single session のため)、ポスター発表件数が多く競争

率は高いと思われる。300USD。

- Gibbs Triangle Award  
J.W.Gibbs の生誕 150 年を記念して 1989 年に設けられた賞で該当者がある年のみ発表され、三元系以上の多元系合金状態図と多元系の熱力学へ多大な貢献をした者に送られる。次に示すように受賞者は著名な研究者ばかりであり、ここでは私の主観を加えながら簡単にこれまでの受賞者を振り返ってみよう。カッコ内は受賞年である。

Larry Kaufman (1989)

先にも述べたがこの分野のパイオニアの一人である。会議には毎回参加され、活発な議論を進められている。CALPHAD ファミリーのゴッドファーザーである。

Tajji Nishizawa (1994)

鉄基合金状態図や磁気変態の研究など多くの業績をお持ちである。日本における状態図研究のパイオニアの一人。たとえば、長谷部、西沢による解説<sup>5)</sup>に状態図計算プログラムが掲載されている (日本ではこれが初のプログラムではないだろうか。また当時の状態図計算研究の動向も詳しく書かれている)、書籍<sup>2)</sup>と合わせて読むと良いだろう。

Arthur Pelton (1999)

現在は FactSage で知られる熱力学計算ソフトウェア F\*A\*C\*T (現 FactSage) の開発グループの一人。酸化物系の状態図の研究は随一。ウィットの効いた講演は私の楽しみの一つである。

Mats Hillert (2000)

Hillert 先生の書籍<sup>6,7)</sup>は計算熱力学の演習書として秀逸 (私の家宝のひとつ)、かなりのご高齢のはずであるが、いまだ第一線で活躍しておられる。

Bo Sundman (2002)

Thermo-Calc の開発者の一人。私が留学中にお世話になった先生である。大変寡黙であるが、自分の著書<sup>8)</sup>をプリントした T シャツを会議期間中に着用。ちょっと面白いところも隠し持つ。

Gunnar Eriksson (2007)

F\*A\*C\*T と統合され現 FactSage となった熱力学計算ソフトウェア Solgasmix の開発者で

ある。本賞を受賞されたときに会議でお見掛け  
しただけなので、パーソナリティは不明。

Hans Leo Lukas (2008)

直接お会いしたことはないが、著書<sup>8)</sup>には写真  
が載っている。種々の熱力学データを用いて熱  
力学モデルのパラメーターを最適化するための  
ソフトウェア Lukas Program の開発者である。  
このプログラムはホームページ<sup>9)</sup>から無償ダウ

ンロードできる。

CALPHAD 会議では、これらの受賞のほか  
にも世界各国の状態図研究機関で組織している  
APDIC(Alloy phase diagram international  
commission)からの表彰もあわせて行われてい  
る (APDIC best paper award, APDIC  
industrial Award )。



図3 カレルシュタイン城での集合写真

### 今回の会議報告

いろいろ書いていたらあまりスペースもなくな  
ってしまったが、今回の CALPHAD 会議につ  
いて報告しないと題名と合わなくなってしまう  
ので触れておこう。今回の CALPHAD 会議は  
2009.5.17-22 の日程でチェコのプラハで行われ  
た。会議の参加者リストによると、参加者の国  
籍は27カ国にのぼり、地域別の内訳はヨーロッ  
パ各国からの参加者が多く全体の約6割、アジ  
アが約2割、北米南米から約2割であった。国  
別では参加者数が多い順にドイツ22名、チェコ  
16名(開催国)、日本15名、フランス12名で

あった。ここ数年の会議参加者リストをチェッ  
クしてみたが、これらの割合はあまり変化して  
おらず、そのときの開催国を除けば、他国に比  
べドイツ、フランス、日本からの参加者数が毎  
回比較的多いようである。日本からの参加者が  
比較的多いのは、日本の状態図研究が学振状態  
図第172委員会を基盤として活発に活動が進め  
られていることが大きいだろう。

今回の会議が始まる直前に、クラスター変分  
法や計算状態図に関して大きな貢献をされてき  
た神藤欣一先生(東工大)の訃報(2009.5.15 ご  
逝去)があった。会議の開会の後、毛利先生(北

大)から神藤先生の訃報についての説明があり、全員で黙祷を捧げ、厳粛な雰囲気の中で会議は始まった。

Young Calphadian conf.ではスペシャルゲストとして Muggianu 氏が招かれた。二元系のパラメーターを三元系へ拡張する場合にはいくつかの方法(Muggianu, Koler, Colinet, Toop)があるが、その中の式の一つを提案された方である。これらの拡張手法の中で現在の CALPHAD では Muggianu 型が採用されていることから、彼の名前(だけ?)は大変有名である。研究よりもものづくりに興味があるとのことで、これまで CALPHAD 会議に参加されたことはなかったが、たまたま別の用事でプラハの近くに立ち寄っていたところ、親交のある今回の主催者 Vrestal 教授に誘われて、Young Calphadian Conf.にのみ参加したとのことであった。名前が有名な割には誰も本人を知らない状態であったので、会場内は全員興味津々(たぶん)の様子であった。その時の写真は CALPHAD ホームページにアップロードされている<sup>10)</sup>のでご覧いただければと思う(ページ上で上から4段目が Muggianu 氏)。ここでさらに、会議で筆者が興味を引かれた講演をいくつか取り上げてみようとも思ったが、スペースも限られており、またたくさんありすぎるので、詳細は割愛して全体的にいつてしまえば、会議トピックスのところでも触れたように、第一原理手法の大きな広がりであり、今回の会議では特に印象的であった。

そして、会議はその後、バンケット(夕食会)とエクスカージョン(遠足)、夕方のクラシックコンサートとアトラクションが続く。今回の遠足はプラハからバスで1-2時間ほどのところにあるカレルシュタイン城で、当日は非常に暑く、しかも城は山の上にあるので、景色は楽しめたものの山登りでくたくたになってしまった(議論でくたくたになったのではないのが残念である)。図3はその時に撮った集合写真である。ここで残念なことを一つだけ。夕方のクラシックコンサートの中に、それを狙ってホテルに空き巣が入ったのである(スーツケースがこじ開けられパソコンや貴重品が盗まれた)。明らか

に会議のプログラムを知り、会議参加者がいない時間帯に盗みに入ったと考えられ、チェコではいくつかびっくりしたこともあったがこれはその内の一つであった。幸い私はコンサートに行かなかったためか被害にあわなかった。そして、さらにいろいろなことがあり最終日の最後の講演が終わると会議も閉会である。そこでは、今回の会議主催者から次回の会議主催者へ図4のベルが受け渡される(表面に CALPHAD のマークが入っている。休憩時間の終了時を参加者に知らせ、会場へ戻ってもらうために鳴らされる)。そして、参加者たちはそれぞれ久しぶりに会った友人と最後の挨拶を交わし会議は終了である。



図4 CALPHADのベル。

#### 会議の開催地

最後に CALPHAD 会議の開催地についてご紹介しようと思う。多くの国際会議では翌年の会議の開催地が決まっているくらいだろうと思うが、CALPHAD 会議では常に約10年先の開催地と主催者が決まっている。これまでの開催地とこれからの開催予定地のリストを表1に示す。次回は韓国の済州島で開かれる予定になっている<sup>11)</sup>。手元のリーフレットによると2010年2月15日が発表申し込みの締め切りなので、もしも、この会議報告をお読みいただいた皆さんの中で、面白そうだなと思われた方、ちょっとでも参加してみようかなと思われた方がいれば、もし間に合えばぜひご参加いただければと思う。そして、ここに書かれていることが本当

かどうか、ぜひその雰囲気をご自身で確認していただければと思う。ただし、ご期待に添えな

かったとしても、それは私の勝手な思い込みだったということで、お許しいただきたい。

表1 CALPHAD会議の開催年と開催地。点線以下はこれからの開催予定地。

1973, Cambridge, USA	1998, Beijing, China
1974, Grenoble, France	1999, Grenoble, France
1975, London, England	2000, Cambridge, USA
1975, Washington, D.C., USA	2001, York, England
1976, Dusseldorf, W. Germany	2002, Stockholm, Sweden, by Bo Sundman and John Agren
1977, Oxford, England	2003, Montreal, Canada, by Arthur Pelton and Chris Bale
1978, Stuttgart, W. Germany	2004, Krakow, Poland, by Zbigniew Moser
1979, Stockholm, Sweden	2005, Maastricht, The Netherlands, by Harry Oonk
1980, Montreal, Canada	2006, Technion City, Israel, by Benzion Weiss
1981, Vienna, Austria	2007, The Pennsylvania State University, USA, by Zi-Kui Liu
1982, Argonne, USA	2008, Saariselkä, Finland, by Marko Hamalainen.
1983, Liege, Belgium	2009, Prague, Czech Republic, by Jan Vrestal
1984, Grenoble, France	
1985, Cambridge, USA	2010, Jeju, Korea, by Byeong-Joo Lee
1986, London, England	2011, Brazil, by Andre Costa e Silva
1987, Irsee, W. Germany	2012, California, USA, by Patrice Turchi and Mark Asta
1988, Berkeley, USA	2013, San Sebastian, Spain, by Tomas Gomez-Acebo
1989, Stockholm, Sweden	2014, Changsha, P.R. China, by Yong Du and Zhanpeng Jin
1990, Amsterdam, The Netherlands	2015, Italy, by Gabriele Cacciamani
1991, Jamshedpur, India	2016, Japan, by Tetsuo Mohri
1992, Jerusalem, Isreal	2017, Grenoble, France, by Alexander Pisch
1993, Barcelona, Spain	2018, Texas, USA, by Raymundo Arroyave
1994, Madison, USA	2019, Singapore by Ping Wu
1995, Kyoto, Japan	2020, Sweden by Malin Selleby and Anders Engström
1996, Erice, Sicily	2021, Africa or Australia
1997, Palm Coast, USA	

## おわりに

最後の最後に一つだけ。先ほど盗難があったと書いてしまったので、もしかするとチェコの印象が悪くなっているかもしれない。最後にチェコの名誉挽回の意味をこめて、チェコのすばらしかったところを挙げておこう。そう、チェコといえばビールである。出発前にそう聞いてはいたが実際に飲んだビールは想像していたよりももっとおいしかった。それに街中どこでもレストランやパブがあり、朝からでもいつでもビールが飲める。おいしいビールがいつでもどこでも飲めるだけでもすばらしいのに、さらにとっても安いのである(場所にもよるが少し大きめの中ジョッキサイズが 200 円程度である)。**図5**はその写真で左がピルス、右がダークでどちらも本当においしい。このビールのためだけにまたぜひ行ってみたいと思う国である。



図5 チェコのビール。左がピルス、右がダーク。PUB内が暗くてピルスナーのきれいな黄金色が出ていないのが残念。

## 謝辞

**図1**と**図2**の1995年以降の講演数データと参加者数データは大沼郁夫先生(東北大)が作成したデータを使わせていただきました。**図3**

の会議の集合写真は Ales Kroupa 先生 (IPM, ASCR) 撮影によるものです。ここで使用・掲載許可をいただいた両氏に感謝いたします。

### 参考文献

- 1) P.J. Spencer, CALPHAD, 32 (2008) 1-8.
- 2) N. Saunders, A.P. Miodownik, CALPHAD – calculation of phase diagrams, A comprehensive guide –, Elsevier (1998).
- 3) CALPHAD home page, <http://www.calphad.org/>
- 4) 小林一昭、金属、79 (2009) 931-934.
- 5) 長谷部光弘、西沢泰二、日本金属学会会報、11 (1972) 879-891.
- 6) M. Hillert, Phase equilibria, Phase diagrams and Phase transformations, 1st edition, Cambridge university press (1998).
- 7) M. Hillert, Phase equilibria, Phase diagrams and

Phase transformations, 2nd edition, Cambridge university press (2008).

8) H.L. Lukas, S.G. Fries and B. Sundman, Computational thermodynamics – the CALPHAD method -, Cambridge university press (2007).

9) Computational Thermodynamics, the calphad method home page, <http://web.mse.kth.se/~bosse/BOOK/CTBOOK.html>

10) CALPHAD XXXVIII home page, <http://www.calphad.org/meetings/2009/foto/index.html>

11) CALPHAD XXXIX home page, <http://www.calphad.org/meetings/2010/index.html>