

論文

オブジェクト指向設計によるアモルファス合金形成領域検出法¹⁾

小島正美

東北工業大学通信工学科

中名生充, 秋山庸子, 伊藤敏行, 和田繁男, 森倫子, 余京智, 大野かおる, 川添良幸

東北大学金属材料研究所

本論文では、アモルファス合金形成領域の検出を行うために次の二点について検討を行なった。①液体急冷法による二元系アモルファス合金データから構成元素の融点、原子半径比、混合エンタルピー、共晶点などをオブジェクト指向データとして保存して、アモルファス形成能を判定するメソッドにより形成領域を検出した。②二元系アモルファス合金データを三元系アモルファス合金データへ継承して、形成領域を検出するメソッドをオブジェクト指向設計法により構築した。三元系アモルファス合金形成領域を検出するメソッドとしては、図的解析法を検討した。その結果、従来のリレーションナルデータベースでは処理できない問題に対してオブジェクト指向によるデータ分析の有効性を確認した。

* * * * * 著者紹介・写真：未

1. はじめに

マルチメディア時代の到来と共に、これまでのRDB(Relational Database)による手法の限界がいくつか指摘され¹⁾、それにかわるデータベースとして、OODB(Object Oriented Database)の研究²⁾が盛んに行われている。本論文では、OODBで使用されているオブジェクト指向の考え方を、アモルファス合金形成領域検出へ応用することを試みた。

共著者のグループでは材料開発研究支援を目的とする金属材料研究所・材料データベースシステム(KIND : KINken Database system)の構築を1988年から行なっている。図1に示すように、本システムはIBM 9121を中心に、光磁気ディスク装置、各種ワークステーションを専用のコンピュータネットワークおよび構内電話回線網で統合化したマルチメディアシステムとなっている³⁾。

材料開発の中で最近特に注目されている材料の一つにアモルファス合金がある。アモルファス合金は

形成方法と組成により、その特性が制御できる性質を有しており、東北大学金属材料研究所をはじめ内外の研究機関で多くの研究がこれまで行われている⁴⁾。しかし、元素の組合せから得られる合金の数は二元系合金で3千以上あり、三元系合金ではさらに1桁多い組合せがある。従って、全て実験によりアモルファス合金形成データを得ることには大変な労力を必要とする。

本論文はオブジェクト指向設計により、これまで行われてきた液体急冷法による二元系アモルファス合金創成のデータ⁵⁾を基に、三元系アモルファス合金形成領域の予測を行なうことにより、アモルファス合金に関する研究の効率化を目指す。このことは三元系アモルファス合金を作成しようとしている研究者にとって大変有意義なことである。

アモルファス合金を構成している各元素および二元系アモルファス合金が持つてある固有の性質(オブジェクト指向で言う属性)，例えば構成元素の融点と共晶点とは合金の状態図から読み取ることがで

¹⁾ Prediction of formation area of amorphous alloys by object oriented design by Masami KOJIMA (Tohoku Institute of Technology), and Takashi NAKANOMYOU, Youko AKIYAMA, Toshiyuki ITOH, Shigeo WADA, Noriko MORI, Jing-Zhi YU, Kaoru OHNO, Yoshiyuki KAWAZOE (Institute for Materials Research, Tohoku University)

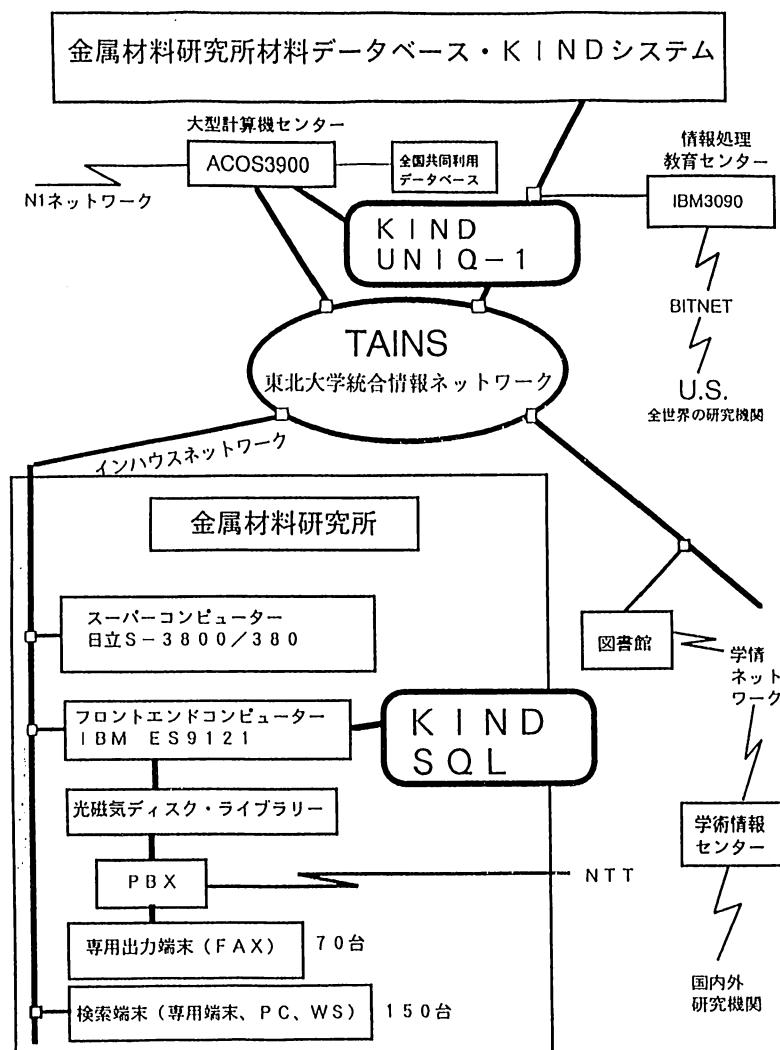


図1 KINDシステム図

Fig. 1 Configuration of KIND system.

きる。各合金が持っている属性値を基に、相対融点低下値判別法 (ΔT_{mr} 判別法⁶⁾)、構成元素の原子寸法比判別法 (r/R 判別法⁶⁾) と液体合金形成エンタルピー判別法 (ΔH_m 判別法⁷⁾) により二元系アモルファス合金形成能を検討し、各々オブジェクト指向データとした。さらにその二元系アモルファス合金データを三元系アモルファス合金データベースに継承させる事により、三元系アモルファス合金形成領域を予測するメソッドを検討する。

2. 二元系合金の状態図

二元系アモルファス合金の形成能を検討する手法としては、合金の状態図が重要な役割を果たしている。そこで、例として Fe-Ti 合金の状態図を図 2 に示し、以下に二元系アモルファス合金の形成能を求める手順を述べる。

図 2 において縦軸は温度、横軸は元素の成分比を表している。共晶点とは、共晶反応が起こる成分比とその温度のこと、共晶反応とは一定温度で液溶

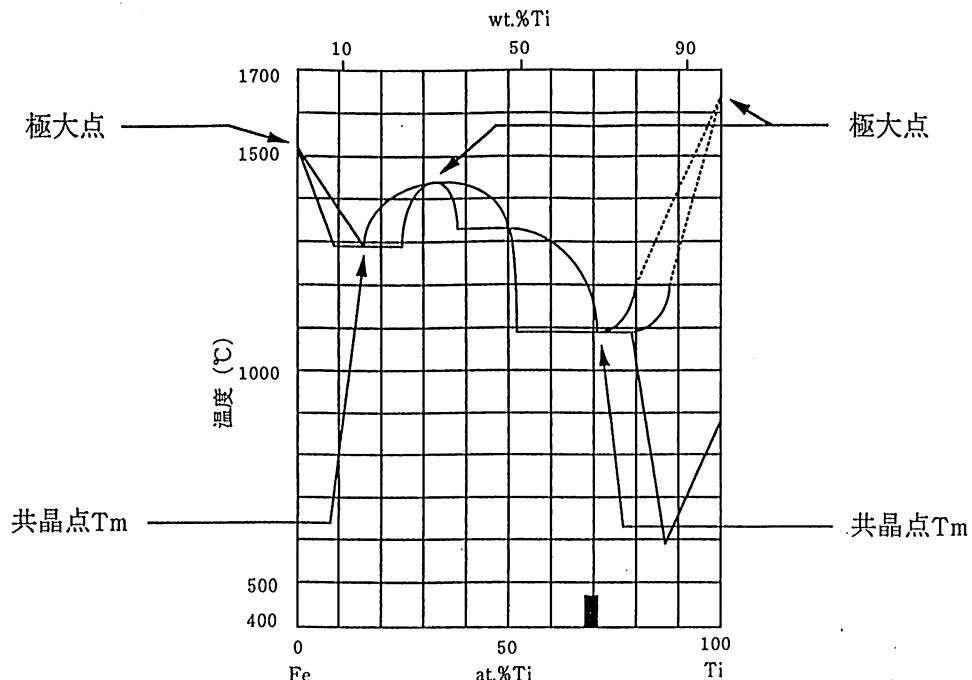


図2 Fe-Ti合金の状態図

Fig. 2 Phase diagram of Fe-Ti binary alloys.

体から同時に二つまたはそれ以上の異なる結晶が析出していく現象のことである。従来からの実験的知見として、共晶点とその近傍の成分比でアモルファス合金が形成しやすいとされている。図中では谷間の部分 T_m に相当する。共晶点が複数個存在する場合は、より深い谷間の部分でよりアモルファス合金が形成しやすいと言われている。そこで、状態図からは深い谷間を検出する ΔT_{mr} 判別法が有効となる。 ΔT_{mr} 判別法だけでは判別不能な場合、 r/R 判別法と ΔH_m 判別法により判別する。これらの判別法に従い、アモルファス合金の形成能を検出する場合、各元素および合金をオブジェクト指向データとすることにより、各元素および合金が有している特徴を有効に利用できる。

3. オブジェクトクラス設計^{8,9)}

オブジェクト指向の大きな特徴の一つは、オブジェクトとメソッドが一体となったもの（これをカプセル化と呼んでいる）を、新たなオブジェクトと考えることができることである。実在する材料は固有の振る舞い（オブジェクト指向ではメソッドと呼ぶ）を持つため、オブジェクト指向による設計は実世界のモデルを実現し易い。

オブジェクト指向によるモデル化には、①静的モデル（オブジェクトモデル）、②動的モデル、③機能モデルの3つがあり、その中でも①のオブジェクトモデルが最も重要である。以下では、クラス図を中心にして、オブジェクト指向による設計法を説明する。

3.1 二元系アモルファス合金のクラス設計

二元系アモルファス合金のクラス設計を図3に示す。二元系アモルファス合金クラスは属性として、元素クラスから継承される元素名、原子量、融点、沸点、原子半径、融点における蒸気圧と二元系アモルファス合金クラスが持っている合金名、共晶点温度、共晶点成分、原子寸法比、液体生成エンタルピー、アモルファス形成範囲、共晶点位置、共晶点毎の ΔT_{mr} を有する。また、メソッドとしては ΔT_{mr} 判別法、 r/R 値と判別基準値の比較を行う r/R 判別法、 ΔH_m 値と判別基準値の比較を行う ΔH_m 判別法を有する。二元系アモルファス合金クラスは、二個の元素クラスから構成される。

メソッド ΔT_{mr} 判別法は属性である共晶点位置、共晶点毎の ΔT_{mr} を用いて、式(1)および(2)により ΔT_{mr} 値を求める。

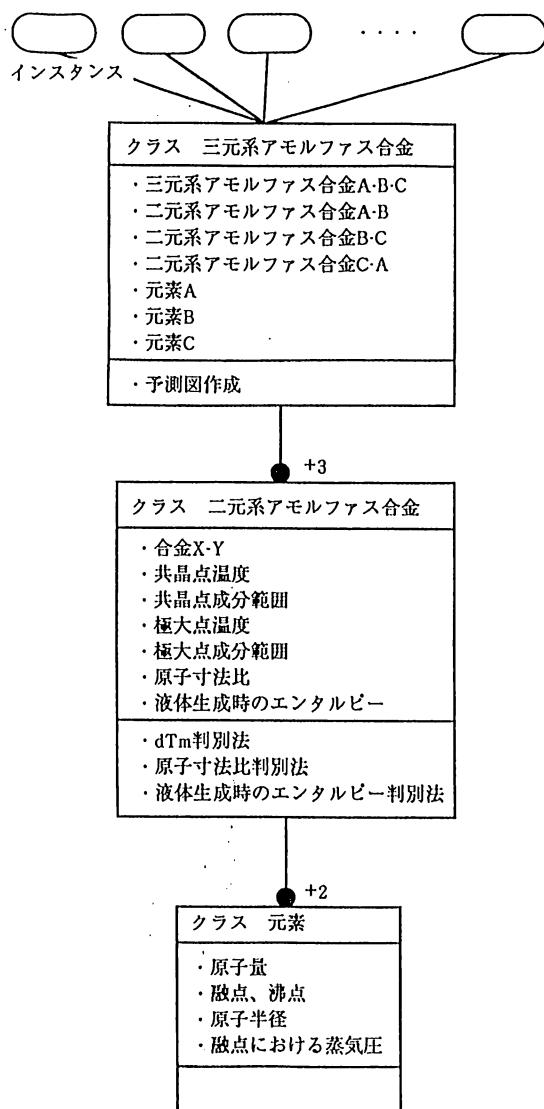


図3 二元および三元系アモルファス合金クラス図
(+3, +2は各々3組, 2組のクラスがあることを表す)

Fig. 3 Class chart of binary and ternary amorphous alloys. (+3 and +2 mean there are 3 and 2 sets of classes, respectively.)

$$T_{av} = (T_{m+1} + T_{m-1}) / 2 \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$\Delta T_{mr} = (T_{av} - T_m) / T_m \quad \dots \dots \dots (2)$$

ここで, T_m は共晶点温度

T_{m-1} は T_m の前のピーク点における温度

T_{m+1} は T_m の後のピーク点における温度

T_{av} は T_m 前後のピーク点における平均温度

ΔT_{mr} は共晶点の融点相対低下値

r/R 判別法		ΔT_{mr} 判別法	
*Ga-Mg	Ca-Mg	Fe-Y	Mg-Zn Mn-P Al-Ge
Cu-Mg	Ag-La	Cu-Hf	Ge-Zr Os-Zr La-Pb
Ir-Zr	Al-Ca	Cu-Y	Hf-Ni Pb-Zr Pb-Si
Nb-Si	Al-La	Cu-Zr	Hf-Si Pt-Zr
Ni-Ta	Al-Si	Fe-Hf	La-Ni Rh-Zr
	Al-Y	Fe-Ti	La-Sn Ru-Zr
	Au-La	Fe-Zr	Nb-Ni Si-Ti
	Co-Hf	Ge-Hf	Ni-Ti Si-Zr
	Co-Y	Ge-La	Ni-Y
	Si-Ta	Co-Zr	Ge-Mn Ni-Zr
*Ge-Nb *Mn-Si			
ΔH_m 判別法			

図4-(a) ΔT_{mr} 判別法, r/R 判別法および ΔH_m 判別法による分類 (図中 *印の付いた合金については本文中の説明を参照のこと)

Fig. 4(a) Classification according to ΔT_{mr} and/or r/R and ΔH_m methods (Alloys with * should be referred the explanations in the text).

r/R 判別法			
*B-Mn	Ag-Dy	B-Ta	Co-Sm Ge-Te Fe-P
	Ag-Pr	C-Fe	Dy-Fe Ni-Pr Ge-Pd
*B-Ni	Al-Sm	Ce-Ni	Fe-Gd Ni-Sm Ni-P
	B-Co	Co-Gd	Fe-Nb Pr-Sm P-Pb
*Ce-Sm	B-Fe	CoPr	Fe-Tb

ΔT_{mr} 判別法

図4(b) ΔT_{mr} 判別法および r/R 判別法による分類
(ΔH_m 判別法のデータ不在)

Fig. 4(b) Classification according to ΔT_{mr} and/or r/R methods.
(in case ΔH_m data unavailable)

図4 合金判別法によって検出された二元系アモルファス合金

Fig. 4 Classification of binary amorphous alloys.

である。式(1)および(2)で求めた ΔT_{mr} 値が 0.33 より大きい場合、その共晶点においてアモルファスが形成し易いと判断する。

メソッド r/R は属性である原子寸法比 r/R 値および判別基準値（実験的に決められた値 0.91）を用いて、 r/R 値と判別基準値の比較を行う。メソッド ΔH_m は属性である液体生成エンタルピー ΔH_m 値および判別基準値 (-21 kJ/solute mole) を用いて、 ΔH_m 値と判別基準値の比較を行う。 r/R の値が基準値 0.91 より小さくかつ ΔH_m 値が基準値 -21 より小さい場合にアモルファスが形成し易いと判断する。

これらのメソッドを用いて、調べたい二元系合金についてアモルファス合金形成範囲を検出し、オブジェクトインスタンス（以後単にインスタンスと呼ぶ）を生成する。

3.2 三元系アモルファス合金のクラス設計

三元系アモルファス合金のクラス設計は図 3 に示すように、二元系アモルファス合金クラスの属性および元素クラスの持っている属性を継承している。三元系アモルファス合金形成領域の予測を行なうためのアモルファス形成範囲は二元系クラスから継承される。すなわち、属性として元素名 : A, B, C およびそれらの元素から構成される二元系合金名 : A-B, B-C, C-A を持っている。三元系アモルファス合金クラスは二元系合金 : A-B, B-C, C-A の形成範囲により継承された値を基に三元系アモルファス合金形成領域を作図するというメソッドを持っている。

メソッド三元系アモルファス合金形成領域予測作図により、アモルファス合金形成の予測が可能となる。実験値との比較から形成領域の予測方法の妥当性を高めることができる。さらに、これらの個々のオブジェクトデータは固有の性質を有し、その性質により個々のオブジェクトデータの抽出が可能となる。

4. 実験結果

二元系アモルファス合金の形成能を検出するために、メソッド ΔT_{mle} 判別法または r/R 判別法と ΔH_m 判別法を同時に満足したのは、図 4-(a), (b) に示した様に、75サンプル中69サンプルである。検出率は92%となった。検出できなかった6サンプル中、図 4-(a) に示すサンプル Ga-Mg, Ce-Nb, Mn-Si は r/R 判別法および ΔH_m 判別法を同時に満足できなかった。図 4-(b) に示すサンプル B-Mn, B-Ni, Ce-Sn は ΔH_m のデータが存在していないので、 r/R 判別法だけでは判定できない。B-Mn と B-Fe は構成元素の特性が非

表 1 三元系アモルファス合金の形成領域予測サンプル

Table 1. Samples of ternary amorphous alloy systems.

合金名	数	合金名	数
A-La-Ni	2	Fe-B-C	1
Fe-P-B	1	Fe-P-C	1
Fe-Ti-B	1	Fe-Zr-B	1
Mg-Cu-Y	1	Mn-Pd-Ge	1
Nb-Si-Ge	1	Ni-Fe-B	1
Ni-Fe-P	1	Ni-P-B	1
Ni-Pd-P	1	Ni-Zr-B	1
Ni-Ti-P	1	Pd-Ni-P	1
Ti-Nb-Si	1	*Ti-Ta-B	1
*Mn-Si-P	1		

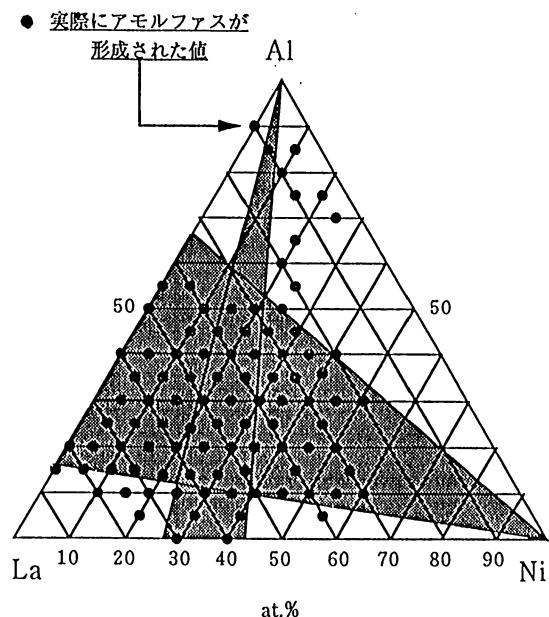


図 5 Al-La-Ni アモルファス合金形成領域予測図
および実測図

Fig. 5 Predicted and measured formation area of Al-La-Ni amorphous alloys.

常に近いので、アモルファス合金が形成できた成分範囲で、両合金の混合エンタルピーが近いと推測される。

二元系アモルファス合金で生成された形成範囲を三元系アモルファス合金クラスへ継承し、形成領域を求めた。表1に示す20サンプルを用いて形成領域予測を行なった。その結果、三元系アモルファス合金形成領域の実測範囲と本方法による予測範囲が一致したサンプルの数は18個で、成功率は90%となった。尚、一致しなかったのはNi-Ta-BおよびMn-Si-Pの2サンプルであった。一致しなかった理由の一つに、両サンプルともデータポイントが1、2個と極端に少ないことが挙げられる。

図5はAl-La-Niの三元系アモルファス合金の実験値（形成データ）をマッピングしてこれに形成予測領域を示したもので¹⁰⁾、予測領域と実験値がよく一致した例である。

5.まとめ

オブジェクト指向設計による三元系アモルファス合金20サンプルの形成領域予測を行なった結果、18サンプルが実験を再現している。今後は、さらにサンプル数を増やし、データのマネージメントシステムを含めたOODBを構築していきたい。さらに、こうして構築したOODBを基に、専門家の知識を学習できる能力を備えたデータベースとして再構築し、未知の三元系アモルファス合金形成領域検出可能なシステムの実現を目指したい。

謝辞

アモルファス合金作成実験についてアドバイスを頂きました東北大学金属材料研究所増本健教授、蔡安邦助教授、オブジェクト指向クラス設計についてアドバイスを頂きました宮城教育大学布川博士助教授に心から感謝致します。

文献

- 1) 牧之内：オブジェクト指向データベース；情報処理, Vol. 32, No. 9, pp. 1032-1040 (1991).
- 2) 宇田川：オブジェクト指向データベース入門；ソフト・リサーチ・センター, p. 352 (1993).
- 3) Y. Kawazoe et al. : Integrated Materials Database System KIND, Sci. Rep. RITU, A, Vol. 37, No. 2, pp. 207-213, (1992).
- 4) T. Masumoto : Recent Progress of Amorphous Metallic Materials , Sci. Rep. RITU, A, Vol. 39, No. 2, pp. 91-102, (1994).
- 5) 水谷ほか：アモルファス合金作成の手引き；アグネ技術センター, 1986.
- 6) B. C. Giessen, et al., : Metallic Glasses, Chapter one, American Society for Metals, 1978.
- 7) B. C. Giessen, et al., : 4th Rapid Quenching metals pp. 213-216, Sendai, 1981.
- 8) James Martin : Principles of Object Oriented Analysis and Design, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1993.
- 9) J. ランボーほか著、羽生田訳：オブジェクト指向方法論 OMT；トップパン, p. 544, 1992.
- 10) Y. Kawazoe, et al., to be published by Springer-Verlag.

(1995年2月22日受付)

(1995年6月26日採録)

著者紹介



小島正美（正会員）

1946年生。1967年東北大学工業教員養成所電気科卒業。同年、東北工业大学工学部助手、1981年同大専任講師、1992年同大助教授。文字認識、オブジェクト指向データベースに関する研究に従事。情報処理学会、電子情報通信学会、日本印度学仏教学会、印度学宗教学会など各会員。



中名生 充

1942年生。1965年仙台市立第二工業高校機械科卒業。同年、東北大学金属材料研究所技官。同所、低温物理学研究室、化合物電子材料物性学研究室などを経て、1988年、材料科学情報室勤務。材料データベース構築、コンピューティングシステムの提供業務に従事。日本金属学会員。



秋山庸子

1947年生。1968年宮城学院女子短期大学教養科卒業。1969年東北大学大型計算機センター、同大計算センター、同大情報処理教育センターを経て、1992年同大金属材料研究所技官。現在材料科学情報室にて材料データベース構築、システム管理に従事。



伊藤敏行

1950年生。1969年宮城県工業高等学校機械科卒業。同年東北大学金属材料研究所技官。現在材料科学情報室にて主に材料データベース構築に従事。



和田繁雄

1950年生。1969年秋田県大館工業高校卒業。同年東北大学金属材料研究所技官。1974年東北学院大学経済学部経済学科二部卒業。現在材料科学情報室にて主に材料データベース構築に従事。



森倫子

1972年生。1992年仙台電波工業高等専門学校卒業。同年東北大学金属材料研究所技官。現在材料科学情報室にて材料データベース構築、計算機、ネットワーク管理に従事。



余京智

1956年生。1982年中国江西冶金学院冶金系卒業。工学学士。1985年中国北京科技大学院修士課程終了。工学修士。同大冶金系助教授。1987年同講師。1993年東北大学素

材工学研究所金属工学博士特別コース終了。1994年工学博士。1993年同大金属材料研究所客員研究員。1994年同助手。1995年同講師。コンピュータシミュレーション、合金熱力学データベース、材料データベース等の研究に従事。著書（共著）"Phase

diagrams and physical properties of non-equilibrium alloys" (Springer-Verlag)。



大野かおる

1955年生。1979年東京理科大学物理学科卒業。1984年東北大学理学研究科物理学専攻博士課程終了。理学博士。同年東北大学教養学部助手。1990年東北大学金属材料研究所助教授。コンピュータシミュレーション、材料データベース等の研究に従事。日本物理学会、米国物理学会など各会員。



川添良幸（正会員）

1947年生。1970年東北大学理学部卒業。1975年同大理学研究科原子核物理学専攻博士課程終了。理学博士。同年、同教養部助手。1981年同情報処理教育センター助教授を経て、1990年同金属材料研究所教授。文字認識、データベース、大規模シミュレーション技法、サイエンティフィックビジュアリゼーションに関する研究に従事。1995年、中国復旦大学顧問教授。同年日本科学技術情報センター学術賞受賞。著書「コンピュータ概説」ほか多数。日本物理学会、日本金属学会、電子情報通信学会、情報処理学会、MRSなど各会員。