

まえがき

熱力学と速度論は、材料を取り扱う技術者にとって基礎学問として特に重要であり、マサチューセッツ工科大学(MIT)においても、材料科学・工学の大学院生は必修の重要科目として学んでいる。熱力学は、反応がどちらの方向に進み、系がより安定な方向に行く指標を与えてくれるものである。一方、速度論は、熱処理の際の溶質原子やイオンの拡散現象や析出現象、界面での化学反応速度や材料の高温酸化等、系がどのくらいの速度で変化していくのかを取り扱う学問であり、両者が揃ってはじめて材料に種々の処理を行った際の変化の状況を把握することが可能となる。

本書は、MIT 大学院材料科学・工学研究科 John F. Elliott 教授の Donald R. Sadoway 博士が、Kinetics Processes for Materials(以下“KPM”)の講義をされたときのノートを基に書かれ、大学および大学院で材料科学・工学を学んでいる学生のみならず、企業の製造現場の技術者や研究開発に携わっている研究者が、速度論の基礎知識を身につけることを目的としている。

著者は、MIT 大学院で修士の学生として学んでいたとき、その講義内容の素晴らしさに感動をおぼえずにはいられなかった。KPM の授業は、当大学院でも最もタフな授業のひとつであると共に、その内容が特に充実していることで評判であった。毎週の授業後に出る演習問題やクイズと呼ばれる筆記試験のために、時には夜遅くまで大学の図書館で文献を調査したり、上級生に尋ねたりして悪戦苦闘の日々が続いたが、こうした努力によって次第に重要な基礎知識を身に付けていったように思う。実際に、大学で基礎技術を習得するには講義を聞くだけでは不十分で、演習問題を自ら解かないと実践でそれを応用することは難しい。日本の大学でも微分方程式や工業数学を学ぶが、それが専門分野でどのように役立つのか、有機的に結びつくのかを理解することが難しいのが現状である。ところが、本講義では、例えば拡散に関することを学ぶ場合、誤差関数やラプラス変換などは演習時に例題を挙げながら学ぶために、微分方程式および数式の物理的意味を理解すると共に、それを専門分野で実際に応用することができる。

本書の特長は、① 数式の導出をわかりやすくするように努めたこと、および② 学んだ理論は例題を通して実際に応用することで理解を深められるようにしたことである。

技術論文や出版物に記載されている数式の中には、途中の計算過程は省略される場合

ii ま え が き

が多い、ところが、文献の中に数式が出てきてその導出がわからないときに、なかなか前に進めなくなる場合がある。微分方程式や積分などは、特に企業の現場、研究所で仕事に従事している技術者あるいは研究者には取っ付きにくく、その式が出てきた時点で文献の内容が理解できなくなることがある。そこで本書では、数式の導出をできるだけわかりやすくするように努めた。その結果、本文をできるだけ簡潔にし、必要に応じて数学の公式等も載せて、数式のフォローに精力を注いだが、若干くどくなっただけならいはある。

次に、いくつかの例題を載せたことであるが、内容を理解し応用できるようになるためには、実際に自分でペンを取って計算を実行し、苦しんで初めて知識が身につくものと考えている。最近では、コンピュータの著しい発達により、複雑な数式も簡単に計算できるばかりでなく、かなり高度な数値解析も実際に行うことが可能となった。したがって、理論的な概念のみを理解するのではなく、実際に例題を解いてみることをお奨めする。

さて、本書の内容について若干説明する。

まず第1章は、拡散に関することを取り扱った。数学モデルを作成するための考え方について述べた後、Fickの法則により拡散方程式を種々の条件下で解いていく。これらは、微分方程式を立てて解くいわゆる厳密解を求める方法について説明したものであり、一部の式は熱伝導などにも応用が可能である。さらに、移動境界の問題や拡散係数の濃度依存について述べた後、コンピュータの普及に伴って今後は解析の主流となる数値解析について、差分法についての考え方のみ簡単に紹介する。そして、拡散の原子論的な取り扱いと原子が移動することによる諸現象についても述べる。

第2章は、材料の反応速度について概説する。スラグの還元速度や溶鉄中の脱炭速度等について、実験データの解析を通して添加元素の影響を評価したりした後、Langmuirの蒸発速度式、吸着等温式について述べる。

第3章は、相変態の速度論について述べる。熱処理によって析出したり、材料が凝固する場合は、核生成-成長-粗大化の過程を経る。そこで、不均一核生成や古典的な核生成理論について説明した後、成長についてはJohnson-Mehlの式、Jacksonモデル、また粗大化についてはOstwald成長について説明し、核生成を必要としない相変態であるSpinodal分解について述べる。

第4章は、固体の高温酸化について、未核反応モデルと粒子の反応により反応物の形状が変化していく場合についての反応速度を計算する。

最後の章である第5章は、セラミックスや半導体であるイオン性固体について電気伝

導度と拡散の相関性等について説明する。

各章の内容は、材料科学および工学関連の大学の学部程度の知識があれば理解できるように作成したつもりである。本書の例題を実際に解いて理解し、さらに実際の研究に応用してこそ材料科学および工学の重要な基礎学問である速度論をマスターする秘訣と考える。

本書執筆にあたって、MIT 大学院 John F. Elliott 教授で、著者留学時の“Kinetics Processes for Materials(コース 3.21)”で講義されていた Donald R. Sadoway 博士は、著者の速度論に対する基礎的な理解を深めて、それを実際の技術に応用できるようにして下さっただけでなく、本書出版に際して快く許可して頂いた。心から感謝する。また、著者の指導教官であった MIT 大学院 Toyota 名誉教授の Merton C. Flemings 博士、および著者が MIT の学生当時の指導教官であった塩原融博士の御助言と御指導がなければ、本書を書くことはとてもできなかった。

さらに、本書出版にあたって、様々な有益な助言を頂き、励まして下さった京都大学大学院工学研究科材料工学専攻教授の松原英一郎博士、出版の困難な作業を快く引き受けて下さった株式会社内田老鶴圃代表取締役社長の内田学氏に対して、ここに深甚より謝辞を申し上げたい。

なお、本書において万一不備な点や誤りがあるとしたら、すべて著者の責任であることを付記しておく。

2015 年 1 月

茅ヶ崎にて
山本 道晴