

析出物ができるときに活性化エネルギーがあり，そのエネルギーバリアは析出核の半径の3乗に比例する体積項と2乗に比例する表面積項とのせめぎ合いの結果出てくるという説明は，材料組織学の教科書や析出硬化の現象論には必ず出てくる常識である．これに対し，阪大名誉教授の藤田は「バリアはない」あるいは「不足分が本体分を越す」のかと疑問を投げ掛けていた [1]．

我々は図1のようなモデルを用いて，上条と福富が提案しているエントロピー計算法 [2] と，第一原理によるエンタルピー計算法とを組み合わせ，Fe-Cu系においてバリアがあることを示した [3]．

とはいえ藤田の炯眼は，Becker-Döring の液滴モデルから，Binder-Stauffer のクラスター理論やモンテカルロシミュレーション，あるいはLanger-Fisher の解析解等につながる核生成理論を理解し，界面エネルギーや歪みエネルギーをどのように取り扱うべきかを示唆している．計算を通じて得た知見を報告する．

[1] 藤田英一，軽金属，**53** (2003), 224.

[2] T.Kamijo & H.Fukutomi, Phil. Mag. A, **48** (1983), 685.

[3] 西谷滋人，まてりあ，**46** (2007), 216.

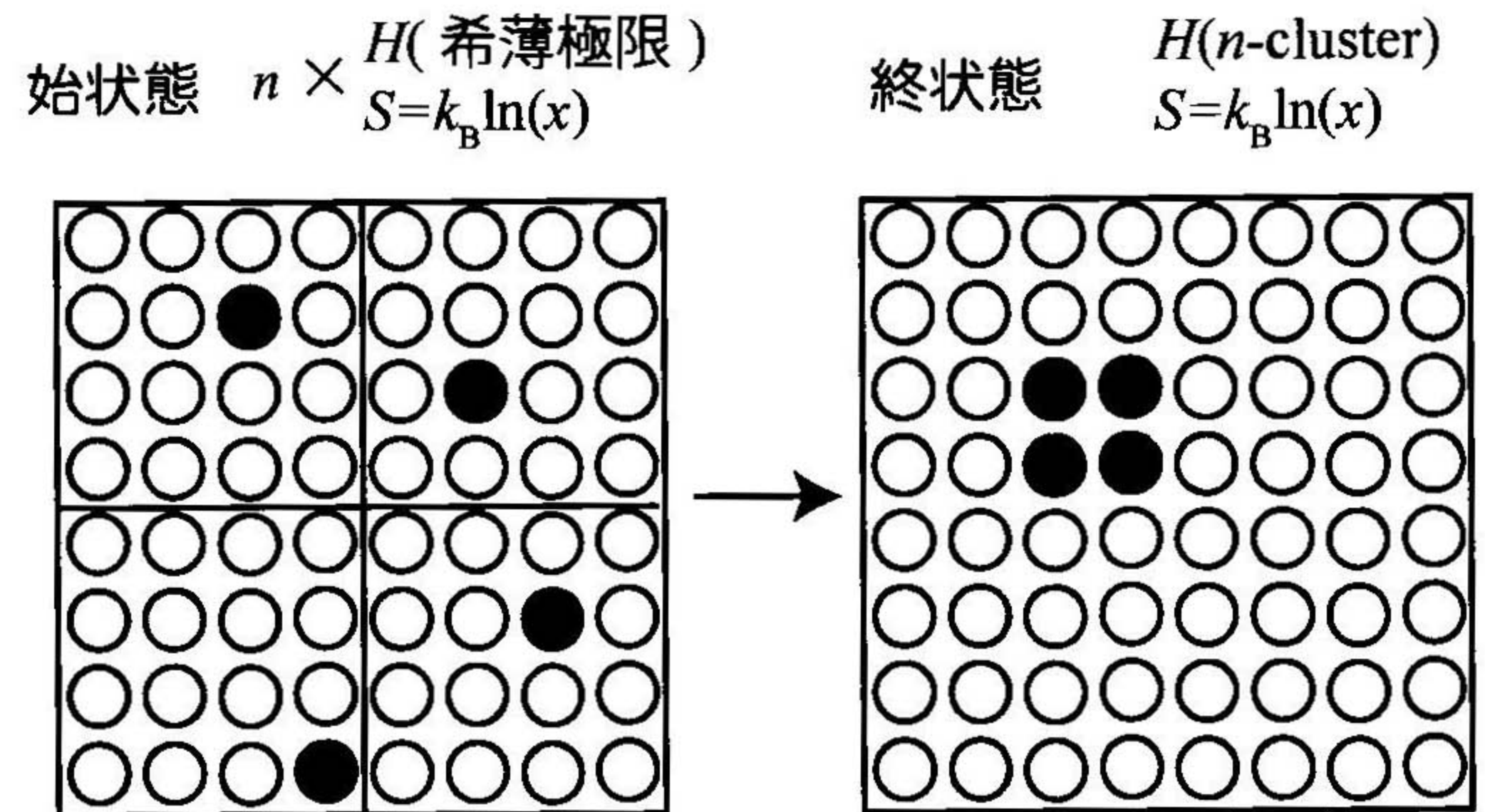


図1 析出核生成モデルの始状態と終状態． H はエンタルピー， S はエントロピー， n はサイズ， x は初期組成をそれぞれ示す．