

カルファド法による熱力学解析

Keywords: 計算熱力学、熱力学モデル、状態図データベース

設計・創造分野 計算構造材料設計グループ

阿部 太一

ABE.Taichi@nims.go.jp | <http://cpddb.nims.go.jp/>, <http://www.nims.go.jp/CSMD/>



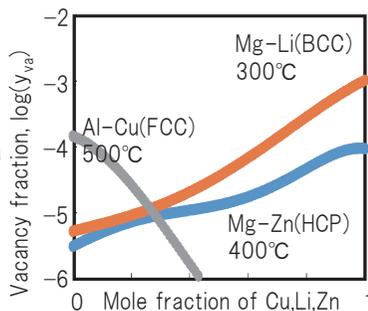
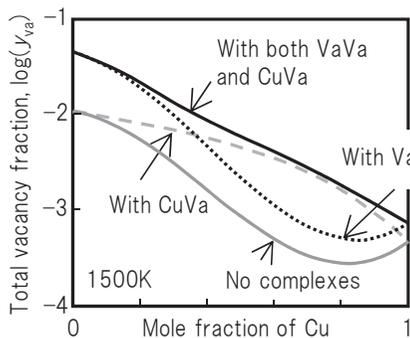
研究の背景

状態図は新規材料開発のための地図と形容されるように、新規材料開発・製造プロセス・合金組成最適化のための有益な知見を得ることができます。これまでに、多くの実用合金・材料の状態図データベースが構築され、公開されています。

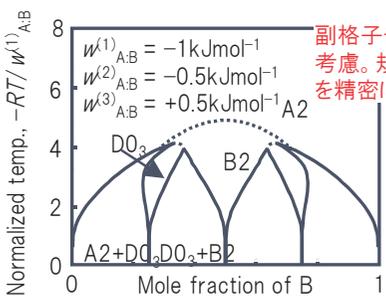
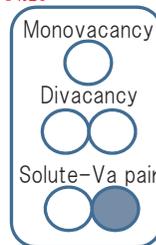
研究の狙い

温度や圧力などの状態変数や実用多元系への自由エネルギーの外挿精度の向上と共に熱力学・状態図データベースを用いた析出・相変態挙動の予測、特性予測の高度化が求められています。これまでに熱力学モデルに陽に記述されていなかった点を改善し、高精度化を目指しています。

最先端研究トピックス



熱空孔(単空孔、複空孔、空孔対)を陽に取り扱うことが可能。



副格子モデルにSROを考慮。規則不規則変態を精密に記述

Computational Phase Diagram Database

1	2	3	4	5	6	7	8	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	Kr	Xe
Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Rn	Rn
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Rn
Fr	Ra	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	Uu	Uu
U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Mn	Uu							

状態図データベースの構築
計算状態図データベース(cpddb)
多くのTDBファイルを収録

文献

T.Abe, K.Hashimoto, M.Shimono, Description of thermal vacancies in CALPHAD Method, Mater. Trans., 59(2018) 580.
阿部太一: "TDB ファイル作成で学ぶ カルファド法による状態図計算" 内田老鶴園 (2015)
阿部太一: "材料設計計算工学 計算熱力学編" 内田老鶴園 (2011)

まとめ

- B-WモデルにおけるSROの記述
- 置換型固溶モデルへの熱空孔の取り扱いの導入
- 粒界相モデルにおける相平衡の取り扱い
- デジタル状態図データベース構築

実用化への目標

- 新規熱力学データベースとして公開
- 現在の計算熱力学データベースの拡充
- デジタル状態図データベース構築