

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/>



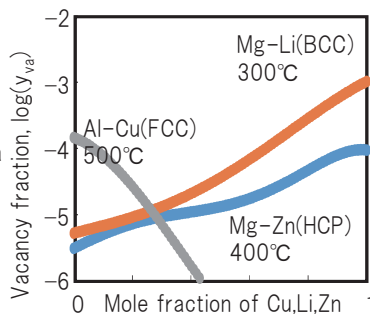
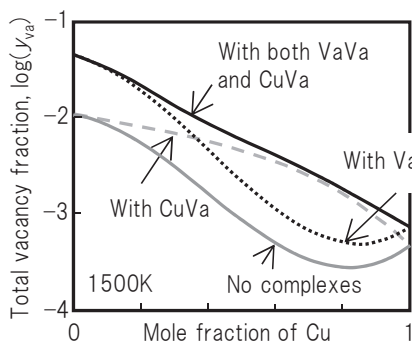
研究の背景

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。

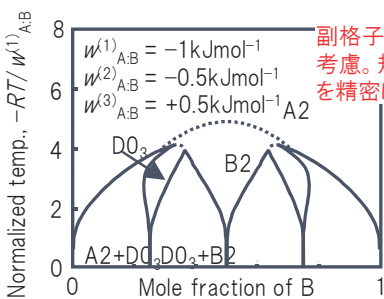
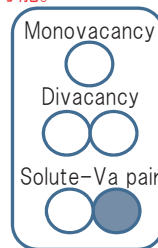
研究の狙い

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	K	Ca
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Rb	Sr
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Ba	La
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	American	France	Germany	Japan	Italy	Spain	United Kingdom	USA	USSR	China	India	South Korea

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