

序 文

合金状態図の先駆けであるロバーツ・オーステンによる Fe-C 状態図の作成から約 100 年が過ぎた。この間、合金状態図の研究は大きな進展を遂げてきたのは周知の通りである。そして、その推進役となっているのが 1970 年頃から始まったカルファド(CALPHAD: CALcuation of PHase Diagrams)法である。CALPHAD 法により状態図を計算で求める試みは、単に二元系や三元系の実験データを再現できるだけにとどまらず、それらを組み合わせて多元化することにより(それほど簡単な作業ではないが)、実用多元系合金の状態図を推定できる点が大きな強みである。すなわち、多元系データベースの構築により、CALPHAD 法を基礎とした計算状態図の適用範囲と有用性が飛躍的に向上したといってもよいだろう。

データベースの基礎となる各相のギブスエネルギー関数は、熱力学解析によって精緻に評価・決定され、学術論文として毎年数多く発表されている。特に近年ではこれまでほとんど実験データがなかったランタノイド系やアクチノイド系の状態図も精力的に熱力学解析が進んでいる。一方、過去に熱力学解析がなされている状態図に関しても、最新の実験データや第一原理計算結果などを用いて、より詳細な再解析が行われ、ギブスエネルギーの高精度化が図られている。この典型例としては先に触れた Fe-C 二元系状態図が挙げられるだろう。しかし、残念ながらこれら最新の解析結果は、熱力学計算ソフトウェアの一般ユーザーがすぐに利用できる状況にはない。論文発表されているが、なかなか熱力学データベースとして利用できないのが現状である。これは、熱力学解析の結果の迅速な普及、そしてより広いユーザーの獲得に対して、大きな障害となっている。また、すでに熱力学計算ソフトウェアを使い込んでいるユーザーであれば、実験データに合わせて、データベースを修正したい、または市販のデータベースに集録されていない新たな元素や相を追加したいと考えるだろう。そのためには、データベースファイル中のパラメーターを理解し、

論文から自分でデータベースを書き起こす必要があるが、多くの論文でパラメーターの誤植などがあり、それらを修正し正しいデータベースファイルを作成する作業は簡単ではない。

この問題に対する取り組みとして、2007年からNIMS熱力学データベースが構築されている。このデータベースには、最新の論文などから書き起こされた約250の二元系・多元系合金のデータベースファイルが集録されている。そして、この間、筆者らのグループでは熱力学データベースの作成方法やパラメーターの修正テクニックなど、多くの経験を蓄積してきた。これらのプロセスは骨の折れる作業であるが、CALPHAD法と熱力学モデルに関する理解をさらに深めることに確実に繋がっている。すなわち、CALPHAD法を学ぶためには、まず論文からデータベースファイルを作成してみることが最短コースであり、そのためには、それらを解説したテキストが有効である。しかし、これまでに計算熱力学や状態図の読み方についてはいくつものテキストがあるが、熱力学データベースに関する解説や種々の熱力学モデルをどのようにしてデータベースファイルとして記述するのかなど、データベース作成に関するテキストはほとんど見当たらない(唯一Thermo-Calc社が無償提供している英語のマニュアルがある)。したがって、本書の目的は、これからCALPHAD法や状態図計算を学ぼうとする方々のため、熱力学データベースの作成方法とそこで用いられる熱力学モデルを解説することである。それにより、研究者・技術者にとって強力なツールである熱力学計算の理解を助けると共に、計算状態図のさらなる普及を図るものである。

そしてデータベースを作成できるようになれば、熱力学アセスメントまであと一歩である。この点は、既刊「材料設計計算工学 計算熱力学編」に詳しいので併せて参考にしていただければ幸いである。また、本書で取り上げているデータベースファイルの記述例、APPEND機能のテスト用ファイルなど必要なファイルはウェブサイトNIMS熱力学データベースからダウンロードできるので、こちらも併せて利用していただきたい。

最後に、本テキストは、物質・材料研究機構(NIMS)の状態図データベース作成グループである橋本清、澤田由紀子、Tatiana BOLOTOVA、藤田咲也の各氏との苦勞の結晶である。これまでに、第2章に書かれているデータベース

作成に関する多くの問題点を共に乗り越えてきたからこそ、このテキストが生まれたといっても過言ではない。本書の執筆に当たっては、長谷部光弘先生(九州工業大学名誉教授)に初稿を精読していただき、多くの貴重なご意見をいただいた。それにより筆者の誤解していた点の多くを修正することができた。ここに心から感謝の意を表す。また、熱力学計算ソフトウェア CaTCalc の開発者である菖蒲一久氏(産総研)、ソフトウェア・データベースのユーザーである戸田佳明氏(NIMS)にも、それぞれの専門的な視点から多くの貴重なご意見をいただいた。このテキストを精読いただいた各氏に心から感謝する。

2015年4月

阿部 太一