

計算熱力学編 増補新版 序文

2011年の出版から約8年が過ぎた。この間、CALPHAD法は着実に進んできた。その大きな流れとしては、例えば第一原理手法を用いて0 Kから高温域までの種々の相のラティススタビリティを決めようとする試み、すなわち第三世代データベースがあり、PyCALPHADなどのフリーソフトウェアに代表されるデータ科学への進展がある。このデータ科学的手法により将来はより迅速に各種の合金系の熱力学解析が進むと期待されている。

少し時代を戻してCALPHADの初め頃のことを考えてみよう。状態図を計算しようとするその第一の目的は、実験による状態図決定の困難さの克服であったが、それに加えて熱力学という学問分野に“計算科学”を導入することで得られた利点は見通しのよさであった。これはHillert教授の言葉である。系の挙動を決めるには、多くの独立変数・従属変数・複合変数、そして種々の拘束条件や内部自由度があり、それらがどのように関係し、どのように振る舞うのか、系が複雑になるとそれらを実際につかむことは困難であった。しかし、計算の俎上に載せることで、それらを自在に定義し扱うことが可能になった。その結果、熱力学という体系の見通しがよくなり、多くの元素からなる多元実用系への実際の適用への道筋が強固になったのである。このことは、先述した第一原理計算手法と機械学習などのデータ科学手法が取り入れられることで、状態図や熱力学がさらに見通しがよくなり、いまだ隠れている状態図の法則が見つかる可能性があることを示唆している。以前、「状態図集を眺めて面白いと思えるぐらいまで理解を深めてほしい」とどこかで書いたことがあるが、なぜ状態図を見て面白いと思うのか、なぜ状態図はその形をしているのかデータ科学はその原因を解き明かしてくれるかもしれない。そして、それら状態図に関する新しい知見は、新しい材料の開発につながってゆくはずである。本書がそのためのCALPHADに関する基礎的知見を与える役目を果たせればと思っている。

この増補新版では、新たに 2.15 節として、CALPHAD 法における純元素中の単原子空孔、複空孔の取り扱い、磁気転移の影響を取り上げた。また、誤字脱字や引用ミス of 修正を行った。ウェブサイトやソフトウェアのアップデートなどの情報も更新した。当時はまだ小さいデータベースであった NIMS 熱力学データベースは、現在では計算状態図データベース (CPDDB) として約 500 の合金系を網羅するまでになった。この CPDDB には 2.15 節で取り上げた熱空孔のデータも収録しているので、興味のある方は試してほしい。この増補新版における修正は、NIMS の橋本清氏に協力いただいた。ここに感謝したい。

2019 年 7 月

阿部 太一