

金属学会セミナー開催報告

状態図と相変態の基盤と応用

—計算工学の観点から—

(セミナー・シンポジウム委員会企画)

開催日 2018年1月15日(月)

場 所 エッサム神田ホール(東京)

1990年代に状態図および相変態関連のセミナーが系統的に開催され、教科書と先端研究の間を結ぶ学術情報を提供することにより、これらセミナーは分野の発展ならびに人材育成に重要な役割を果たしてきた。近年、計測分析機器の高度化と材料計算技術の進展により、当該基礎分野における従来の知見を、あらためてより深くかつ普遍的に理解することが可能になりつつある。そこで、本セミナーは、状態図と相変態の基盤から現在の先端までを橋渡しする基盤の内容を、計算工学の観点から集約し、最近の研究成果も織り込みながら系統的に解説する構成とした(1月15日、エッサム神田ホール1号館、参加者数23名、講師6名)。内容は以下のようにまとめられる。

飯久保 智(九工大)は、「第一原理計算と合金状態図」について、まず Calphad 法における合金熱力学の基礎と、第一原理計算の基本的考え方を、ソフトウェアの紹介も含めて概観し、両者の相補的関連性を解説した。また電子論での絶対0度における計算と状態図の熱力学パラメータとの関係、およびフォノンの分散関係の第一原理計算を介した有限温度の自由エネルギー評価について言及した。さらに Fe-Ti-S 系に関する最近の計算結果に基づき、具体的な適用例を紹介した。

菖蒲一久(産総研)は、「計算熱力学と熱力学データベース開発」と題し、現状の各種状態図計算ソフトウェアの問題点(特にラインコンパウンドにおける化学ポテンシャル不定問題や、強い短範囲規則を含む液相の熱力学モデル)を、具体的計算例とともに浮き彫りにするとともに、自身が開発しているわが国発の状態図計算ソフトウェア CatCalc の改善点について紹介した。また基盤材料の熱力学データベースの不備とその修正に伴う問題点についても言及し、広く普及した熱力学データベースの持つ新たな課題を指摘した。

澁田 靖(東大)は、「分子動力学法による核形成-成長現象の理解」に関して、まず分子動力学法(MD)の計算の基

礎について、特にアンサンブルの取り方に起因する計算法の差異を詳細に説明するとともに、世界最大級の10億原子による大規模計算例として、凝固および結晶粒成長の解析結果を示した。また計算における原子間ポテンシャルの留意点についても言及した。古典 MD の計算領域がついにマイクロオーダーに迫る時代が到来し、各種の平均場理論やメソスケール計算とのブリッジングなどについても紹介した。

小山敏幸(名大)は「スピノーダル分解—その基礎から発展へ—」と題し、あらためてスピノーダル分解の発展史をまとめ、核形成の理論の発展とスピノーダル分解理論の進展の繋がりについて言及した。また勾配エネルギーの理論的解析に焦点をあて、離散型モデルに基づき濃度勾配エネルギーを定式化し、さらに連続体モデルの濃度勾配エネルギーと比較することによって、両者の相違点を明確化した。また離散型モデルにおける相分離シミュレーション例を示し、規則相を含むスピノーダル分解を、離散型モデルで解析する利点について説明した。

塚田祐貴(名大)は、「マルテンサイト変態の微視的機構」に関して、フェーズフィールド(PF)法に基づく最近の解析について述べた。まず PF 微視的弾性論の基礎について解説するとともに、鉄鋼材料のラスマルテンサイト変態の微視的機構に関する PF モデルを紹介し、特にラスマルテンサイトでは、そのバリエーションだけでなく、マルテンサイト内部の転位やオーステナイト内部の転位まで考慮した解析で、はじめて晶癖面が計算される点などを紹介し、微視的な機構に関する新しい知見について、最近のインフォマティクスを活用した試みも含め言及した。

諏訪嘉宏(新日鐵住金)は、「再結晶・粒成長予測における数値解析の活用」に関して、この分野における従来の平均場モデルを詳細にまとめるとともに、各種のパターン形成のシミュレーション手法の長所・短所を比較し、特に PF 法の利点について言及した。さらに、具体的に PF 法を用いて再結晶・粒成長を計算する際の留意点についても系統的に解説し、介在物によるピンニングの影響等も含め、各種の適用例を紹介した。

状態図および相変態を冠した金属学会セミナーは約20年ぶりの開催で、かつこの20年の間に計算工学分野が大きく進展したこともあり、今回のテキストには、この間の進展が凝集されている。第一線の研究者・技術者だけでなく、是非とも学生・若手研究者・技術者に一読いただきたいと思う次第である。

(文責：小山)

(企画世話人代表：名古屋大 小山敏幸)

