

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)



金属学会セミナー(特別講座)開催報告

状態図・相変態の基盤と実践的ノウハウ —CALPHAD法とフェーズフィールド法を 使いこなすために—

(セミナー・シンポジウム委員会企画)

開催日 2017年12月13日(水)~14日(木)
場 所 エッサム神田ホール(東京)

従来の金属学会セミナーに、新カテゴリー[特別講座]が追加され、今回が記念すべき第1回で、またセミナー・シンポジウム委員会企画でもあるため、まず経緯について述べさせていただきます。

従来、金属学会セミナーの趣旨は以下のように規定されている:「研究者・技術者に対する啓発あるいは教育・育成活動の一環であり、専門家同士の研究発表・討論の場であるシンポジウムとは異なる。セミナーにおいては、各分野の専門家が定説的・基礎的な理論・原理あるいは実験解析方法などを応用面への展開を考慮しつつ、新たに学ぼうとする研究者・技術者に解説し、その知識向上に資するという機能を重視する。」このようにセミナーは教育を軸足とした基礎的な勉強会であるが、昨今、材料科学・工学の学問分野が高度化・細分化・多様化する傾向にあり、基盤内容も厚みを増す一方であるため、これを受けて、従来のセミナーが、以下のカテゴリーに分類された。

[1]金属学会セミナー:研究者・技術者に対する啓発あるいは教育・育成活動としてのセミナー全般。

[2]金属学会セミナー(特別講座):金属学会セミナーの中でも、特に基礎・基盤的な教育効果に重点をおいたセミナー。

[1]が従来のセミナーで、[2]が新セミナーに対応する。今回、本会における基盤の1つとして、状態図・相変態を題材に、CALPHAD法およびフェーズフィールド(PF)法への架け橋となるような勉強会を、セミナー・シンポジウム委員会として企画させていただいた。委員会としては、新しい方向性を見据えながら、「金属学の基礎・基盤が学べる[特別講座]のラインナップ」を整備することも意図している。

さて今回の内容についてみていこう。セミナー(特別講座)では、テキストに既存の教科書を使用できるので、今回、以下の3冊を採用した。

①西澤泰二:「マイクロ組織の熱力学(講座・現代の金属学材料編2)」, 日本金属学会, (2005).

②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」, 内田老鶴圃, (2015).

③小山敏幸:「材料設計計算工学(計算組織学編)」, 内田老鶴圃, (2011).

講師はこれら教科書に関係の深い3名(以下敬称略):大沼郁雄(NIMS), 阿部太一(NIMS), および筆者であり、2日間で、10講義(各1時間)を実施した。講師間で事前について調整し、3つの教科書を組み合わせることによって1つの体系となるよう工夫した。10講義の内容と担当は、以下のようにまとめられる。

(1)小山:熱力学の基盤[①の1章と2章, ③の2章;記憶図を中心に熱力学関数の基本を説明]

(2)阿部:正則溶体近似から副格子モデルへ(溶体・化合物の熱力学)[①の2章, ②の3章;1成分系の熱力学モデル]

(3)大沼:正則溶体近似から副格子モデルへ(溶体・化合物の熱力学)[①の3章;溶体相の熱力学モデル]

(4)大沼:状態図に関する高度な理解(状態図の熱力学と規則化の熱力学)[①の4章;不規則相に関する状態図の熱力学]

(5)阿部:状態図に関する高度な理解(状態図の熱力学と規則化の熱力学)[①の7章;副格子モデルと規則相に関する状態図の熱力学]

(6)小山:界面の熱力学[①の5章, ③の3章;界面エネルギー, 勾配エネルギー, 粒相モデル]

(7)小山:相変態の速度論(拡散, 核生成, 成長の熱力学とダイナミクス)[①の6章, ③の5章;状態図の平衡論と拡散の速度論との関係(CALPHAD法からPF法への架け橋)]

(8)大沼:相変態の速度論(拡散, 核生成, 成長の熱力学とダイナミクス)[①の8章, 9章;核形成および成長の熱力学]

(9)阿部:CALPHAD法とPF法[②の1章と2章;CALPHAD法:TDBファイルおよびPOPファイルの活用法等]

(10)小山:CALPHAD法とPF法[③の6章と7章;PF法(拡散変態と構造相転移)]

[12/13, 14, エッサム神田ホール(2号館), 受講者数39名].

初の試みであったが、関係各位の多大なるご支援・ご協力により、盛会の内に終えることができた。あらためて心より感謝申し上げる次第である。今後10年で、このようなラインナップが積み重なり、学会の基礎・基盤領域の活動が、ますます重厚となることを期待したい。(文責:小山)

(企画世話人代表:名古屋大 小山敏幸)

