

企画にあたって

水本将之*

近年の電子計算機および情報処理技術の加速度的な進歩は、計算科学シミュレーションの世界においても、適用範囲の拡大と高精度化に目覚しい発展をもたらしている。材料分野における研究開発についても例外ではなく、計算科学シミュレーションの大規模化と高精度化により、膨大な組み合わせの合金組成の中からコストと時間をかけて有望な合金組成を絞り込む従来の試行錯誤的手法から、第一原理計算や熱力学計算などの各種シミュレーションを活用することによって合金の組織形成過程や物性発現機構を理解し、有望な合金組成や組織の効率的な発見と検証へとつなげる計算科学的手法への転換が進み、それにより多くの新規物質の発見や材料の高機能化が達成されている事実からみても、計算科学的手法は現在の材料設計において必要不可欠なツールとなったと言える。計算科学的手法は、適用する物質のサイズと対象とする現象の時間スケールによって分類されるが、その中でも macroscale での組織形成や物質移動のシミュレーションが可能な熱力学計算は、熱力学データベースの充実化と熱力学モデルの高度化により、鉄鋼材料をはじめとした多くの構造用材料の研究開発に応用されて成果をあげており、様々な学術団体で注目されているマテリアルズインテグレーションの推進の観点からも、今後ますます重要になると考えられる。そこで本ミニ特集では、「熱力学計算による構造材料の設計と展開」と題して、専門家から熱力学計算を用いた合金組織の予測と実用構造用材料の研究開発への応用事例について解説していただいた。さらに、各企業における鉄鋼材料を対象とした材料設計や組織予測への熱力学計算の適用事例および成果について解説していただいた。

はじめに、非鉄材料系の構造用材料への適用事例について解説していただくために2件の記事を集めた。大沼郁雄 教授(物質・材料研究機構)には、「Cu 合金の熱力学データベース構築と構造材料開発への応用」と題して、CALPHAD 法による Cu 合金の特性に及ぼす添加元素の影響の予測と高効率実験手法を併用することで、迅速かつ精緻な合金設計を可能にし、新規 Cu 合金の開発に成功した事例について、熱力学モデルの基礎理論を踏まえて紹介していただいた。次に、野本祐春氏(伊藤忠テクノソリューションズ)には、「非鉄系合金における熱力学計算連携によるフェーズフィールド法組織形成予測」として、熱力学データベースと連携させたフェーズフィールド法を用いることによる非鉄材

料の様々な時間スケールにおける凝固現象に伴う組織形成の正確な予測について、いくつかの事例を挙げて紹介していただくと共に、熱力学データベース連携フェーズフィールド法の現状と課題について解説していただいた。続く3件は、非鉄材料系と比較して熱力学計算を援用した材料設計の事例が豊富な鉄鋼材料への適用事例についての記事である。林宏太郎氏ら(新日鐵住金株)には、「高強度鋼板におけるフェライト変態の制御と熱力学計算」と題して、高強度鋼板における連続冷却中の α 変態挙動に及ぼす添加元素の影響を熱力学計算により理解するアプローチについて紹介していただき、合金設計への熱力学計算の有用性について解説していただいた。また、山下孝子氏(JFE株)には、「高精度 FE-EPMA と拡散律速型変態ソフトによる2相域焼鈍中の鋼中炭素の分配挙動の解析」と題して、熱力学ソフト Thermo-Calc のサブルーチン機能である拡散律速型変態ソフト DIC-TRA を用いた鋼の2相域焼鈍初期の炭素の分配挙動の予測について、微小領域での高精度な炭素分析を可能にした FE-EPMA による分析例との比較とともに紹介していただいた。さらに、石倉亮平氏(大同特殊鋼株)には、「熱力学計算を利用した真空浸炭材の炭素濃度分布予測および合金設計」として、熱力学計算による真空浸炭機構の解明とそれに基づいたエッジ部での過剰浸炭を克服した真空浸炭用鋼材の合金設計について紹介していただいた。

本ミニ特集により、本学会会員に熱力学計算による構造材料設計の現状および将来展望についての理解を深めていただき、構造材料のみならず材料全般の研究開発の迅速化の一助となることができれば幸いである。

最後に、本特集を企画するにあたり、ご多忙にもかかわらず執筆を快諾して頂いた先生方および企画の実現に多大なご尽力を頂いた第5分科2グループの編集委員の皆様、この場を借りて心より御礼申し上げます。



水本将之

 2000年 九州大学大学院工学研究科博士後期課程修了
 2000年 長崎大学工学部 助手
 2009年 岩手大学工学部 准教授
 2016年9月- 現職
 専門分野: 鋳造工学, 金属基複合材料
 ◎金属基複合材料の製造プロセスおよび特性評価に関する研究を中心に異材接合界面の新規応用技術の開発に従事。

* 岩手大学理工学部物理・材料理工学科; 教授(〒020-8551 盛岡市上田4-3-5)
 Preface to Special Issue on Application of Thermodynamic Calculation to Microstructure Design of Structural Materials; Masayuki Mizumoto (Department of Physical Science and Materials Engineering, Iwate University, Morioka)
 Keywords: CALPHAD (computer coupling of phase diagrams and thermochemistry), thermodynamics, multi-phase field method, quasi-equilibrium, phase transformation, Cu alloy, steel, carburizing mechanism
 2018年7月17日受理[doi:10.2320/materia.57.419]