特集「計算状態図と材料設計への展開」によせて

企画世話人 石田 清仁¹ 長村 光造² 貝 沼 亮 介¹ 奥 田 浩 司³

計算状態図に関わる研究は、最近の計算モデル、計算機性能などの飛躍的发展により、実用状態図の高精度化、第一原理計算との結合、時間に依存した相変態研究との有機的な結合など、多面的な発展を続けている。平成 12 年に本誌 64 巻 6 号において「計算状態図と材料設計」として 9 編の論文からなる特集が刊行された。本企画においては、前回企画後の実用および第一原理計算状態図計算とその応用の発展をふまえ以下のような観点からの投稿を呼びかけ、11 編の論文が投稿された。

1. 第一原理計算の CALPHAD への応用
2. 計算状態図の材料組織設計への応用
3. 新規物質および極限状態の状態図の解明と体系化
4. 商用状態図ソフトの実プロセス解析への応用の現状

計算状態図の発展には計算モデル、手法の開発と、新材料・環境条件への実験的展開・データベースの蓄積が両輪として必要である。状態図に対する第一原理計算からのアプローチを進める場合、計算の高精度化にとどまらず、状態図の高精度化のキーとなる効果の抽出、あるいはプロセス解析などへの展開の容易な古典的なモデルとの対応関係など、展開すべき課題はまだ多い。毛利らは FePd 系の第一原理計算を例として、クラスター展開による多体エネルギーの系統的な拡張の際に重要となる、相互作用エネルギーと規則相の生成エネルギーの代数的な関係からの考察をおこなった。また、世古らは第一原理状態図計算の手法を利用して、従来古典的なエネルギーモデルで取り扱われてきた核生成の問題に第一原理計算を適用し、澤田らは鉄中の侵入型元素と置換型元素の相互作用エネルギーを第一原理で求めた。

一方、状態図の実験的決定や熱力学的評価という側面から、佐藤らは Co-W の実験状態図と磁気変態を含めた状態図計算の比較検証を、藤永らは高圧下の共晶温度の変化について、菖蒲らは平衡計算ソフトウェアの開発に関して報告した。

最後に、計算状態図の手法や計算状態図の評価などから得られる熱力学量を利用した組織制御・プロセス制御への展開に関し、徳永らは Ni-Si-B 系のアモルファス形成能の評価、小山らはフェーズフィールド法による FePt ナノ粒子の規則化シミュレーション、大道らは Thermocalc の DICTRA モジュールを利用した Fe クラッド界面の析出挙動、山下らは Fe-Cu 合金の低温時効処理での Cu クラスターの核生成・成長の過程、奥田らは Al 合金を想定した PFZ 近傍組織の形成機構を報告した。

以上のように今回の特集では、上記の単一の観点に関するものというよりはいくつかの観点にまたがる問題意識による投稿が多く、この分野が間口も奥行きも広く深くなりつつある現状を示している、その一方、特に展開的な研究に用いられるモデルが第一原理から古典モデルまで多岐にわたる現状が示すように、時間および長さ・系のスケールがどのレベルにある場合にどのモデルを用い、それらがより厳密なモデルへとどのようにシステマティックに接続されるべきか、という整理、体系化はまだ途上にあると考えられる。

本特集号の趣旨にご賛同いただき、ご投稿いただきました著者各位に感謝いたしますと共に、厳正な校閲を賜りました校閲者をはじめ、編集委員、編集スタッフ各位にこの場をかりてお礼申し上げます。

(2004 年 11 月 25 日受付)

¹ 東北大学大学院工学研究科材料物性学専攻

² 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻

³ 京都大学国際融合創造センター

“Computer Aided Phase Diagram Assessment and Its Extension to Materials Design” Kiyohito Ishida (Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai 980-8579). Kozo Osamura (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, Kyoto 606-8501). Ryosuke Kainuma (Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai 980-8579), Hiroshi Okuda (International Innovation Center, Kyoto University, Kyoto 606-8501)

Keywords: first-principles calculations, cluster expansion method, precipitation, CatCalc, high Pressure effect, CAL-PHAD, phase equilibrium, phase separation, amorphous-forming ability, order-disorder transition, Phase-field method, nano particles, diffusion, Monte Carlo method, atomic pair interaction