

# CALPHAD（計算状態図）の基礎と組織制御・材料開発への応用

大沼 郁雄

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット

近年，米国の Materials Genome Initiative (MGI) [1]や欧州の ICMEg (Integrated Computational Materials Engineering) など，最新の実験・計算技術や様々なソフトウェアとデータベースを活用し，高効率かつ短時間での材料開発を達成することを目的としたプロジェクトが推進されている．1970年代以降，熱力学データベースを用いて状態図を計算する CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) 法[2]が実用材料の開発に活用されるようになって久しく，成熟期を過ぎた古めかしい印象も否めないが，依然として MGI や ICMEg などにおける基盤技術としての重要性が認識されている．本講義では，特に，実験では十分な情報が得難い相分離や規則化を対象に，CALPHAD 法を活用した合金設計と組織制御について紹介する．

CALPHAD 法は各種合金や酸化物等の熱力学データベースを計算ソフトウェアに取り込み，多元系合金の状態図を計算する手法であり，相平衡，相分率，相変態の駆動力等，多種・多用な性質の計算結果が合金設計に活用できる．

図 1 (a)に Cu-Ni-Al 3 元系の計算状態図を示す．Cu-Ni-Al 合金を破線の 900°C で溶体化熱処理すると広い濃度範囲で fcc 固溶体が得られ，その後 500°C で時効熱処理すると，析出強化と導電率向上が期待できる．(b)に示す拡散トリプル法により作製した fcc-(Cu,Ni,Al)固溶体試料に時効熱処理を施した後，硬さと導電率を測定し，最適な合金組成を決定した．得られた結果に基づき，高強度－高導電性 Cu 基合金を開発・実用化した．

## References.

- [1] G.B. Olson, Scripta Mater., 70 (2014), 1.
- [2] N.Saunders and A.P. Miodownik, CALPHAD - A Comprehensive Guide, Pergamon Press, Oxford, 1998.

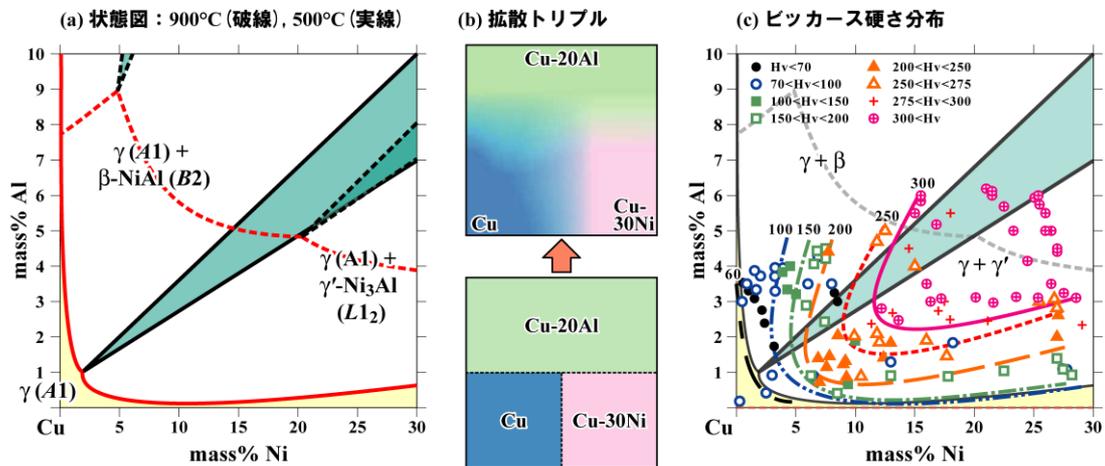


図 1 Cu-Ni-Al 3 元系計算状態図とコンビナトリアル法による合金設計

