

File 5

信頼できる熱力学計算ソフトで材料開発を効率化・コスト削減!



産業技術総合研究所
九州センター
生産計測技術研究センター
計測基盤技術チーム
研究チーム長
理学博士
葛浦 一久氏

高信頼性熱力学ソフト ～状態図や平衡計算が容易に～

平成14年度～

PC上で結果を正確にシミュレート! 実験にかかる時間を大幅カット

異なる物質を接触させると、一般的に化学反応が起こり、熱的に安定な状態になる。それがほぼ収束し、安定した状態を「熱平衡状態」という。様々な物質を取り扱う材料開発において、この熱力学的平衡の解析は欠かせないものだ。葛浦氏は20年に渡る材料開発の中、一つひとつ実験によって検証を重ねる期間を短縮したいと考えていた。そこで熱力学解析を行うソフトウェアの導入を検討してみたが、基本的な数値計算が正確ではない場合があり、特にセラミックス系やガスが含まれる

場合の平衡計算は信頼性が低いものだった。葛浦氏は独自の解析ソフトの開発に踏み切った。そして約8年の期間を経て、製品化されたのが「CaTCalc」だ。開発においては「信頼性と品質、使い勝手」が最重要視された。あるセラミックスメーカーが使用し、実験結果と比較したところ、その正確性に驚いたという。葛浦氏は「ソフトの習得という点に垣根を感じる方もいるでしょうが、長期実験にかかる費用を考えれば、大幅なコストダウンになると思います。ぜひデモ版を使ってみてください」と語る。

課題と対策

材料開発において欠かせない熱力学解析の課題点

実験では

- ・検証に長期期間を要する
- ・人件費・光熱費等コスト大

従来のソフトによるコンピュータ解析では

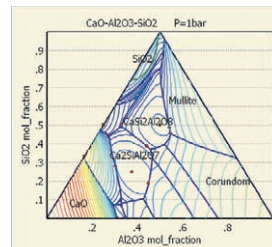
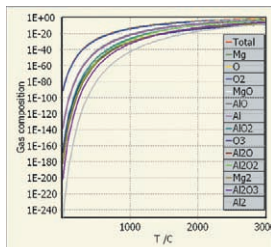
- ・計算結果の信頼性が低い
- ・使い勝手が悪い

信頼性が高く使い勝手がよい熱力学計算ソフトを開発する!

研究と成果

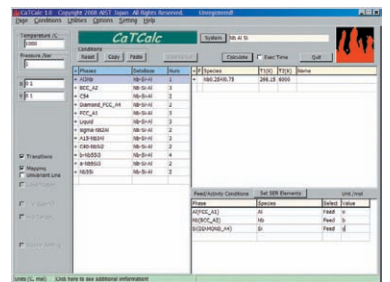
●熱力学解析ソフト「CaTCalc」を製品化

- ・金属やセラミックス系、ガスが含まれる場合の平衡計算が正確にできる!
- ・わかりやすい操作性
- ・状態図や凝固シミュレーション等の機能も搭載



蒸気圧、蒸気成分。他ソフトではこのような微量成分は正しく計算できない

液相面図。温度極値の計算はCaTCalcの特徴



CaTCalcメイン画面

更に 熱力学データベースの整備、水溶液系の計算機能の開発を推進中! 完成すれば国内唯一の知的基盤に!

●「CaTCalc」デモ版をWEBで配信中

<http://www.materials-design.co.jp/catcalc/>

今後の展開と可能性

熱力学データベースを整備し、国内唯一の知的基盤を形成

材料開発や使用環境における各種化学反応の解析等への応用

展開 熱力学を上手に応用して 研究開発期間を短縮・コストダウン

展開 材料開発以外でも、各種化学反応の解析などへの応用の可能性

例えば **セラミックス製造業** など

例えば **化学薬品業** など

ソフトを使うことで実験の手間が省け、新しい開発に着手できるなど、作業効率がUP! さらに熱力学データベースが整備されれば、利便性がUP!

水溶液系のデータベースが整備できれば、水質汚染の度合いなどを解析し、環境問題の改善に。

詳しくはこちらへ

連絡先 | 〒841-0052 佐賀県鳥栖市宿町807-1 独立行政法人産業技術総合研究所 九州センター 九州産学官連携センター
TEL: 0942-81-3606 FAX: 0942-81-4089 E-mail: q-sangakukan1-ml@aist.go.jp URL: <http://unit.aist.go.jp/kyushu/ci/index.html>