

(5) 鉄鋼における熱力学データベースの活用

新日本製鉄(株)未来領域研究部
山田 亘, 松宮 徹

新日鉄では、熱力学解析システム THERMO-CALC および平衡計算ソフト SOLGASMIX を導入し、主に製鋼研究への利用を図ってきた。THERMO-CALC に用意されている DB は広範囲のデータをカバーしており、鉄鋼の研究での利用価値は極めて大きい。実際の応用においては再評価が必要なものがあつた。例えば、製鋼研究で重要なスラグのデータ整備が不十分であつた。我々は、スラグの熱力学モデルの評価を実施しデータベースの補充を行いつつ、平衡解析ソフトを DB と結合してスラグ/溶鋼平衡計算、非金属介在物融点解析を行ってきた。また、これら平衡計算の枠組を基礎にして、凝固偏析モデル、非金属介在物生成モデル等の現象モデルを組み合わせるにより、DB 上の熱力学データから実操作でより重要となる量を計算し、操業最適化の検討の道具としている。講演では、当社の熱力学 DB 利用に関する考え方、利用の現状と問題点について報告した。

(6) ChemSage によるアクチノイド合金の熱力学的モデル

日本原子力研究所 小川 徹

使用済み燃料中の超ウラン元素 (Np, Am) を回収し、特殊な原子炉や加速器を用いて消滅処理しようという構想がある。このような消滅処理システムは従来の燃料サイクルシステムより高い包蔵性が要求される。現在、合金燃料と高温化学再処理法との組合せが有望視されている。

しかし、アクチノイドの合金や熔融塩に関する基礎的データは乏しく、実験も容易ではない。適切な実験と熱力学的な解析を組み合わせることによって、データを有効に活用し、合金の挙動予測やプロセス設計に役立てることが必要である。

照射データの豊富な U-Pu-Zr 合金燃料を例にとり、コード ChemSage を利用した三元系熱力学モデルの作成や、照射による大きな温度勾配に伴う熱拡散解析を行った。

現在進行中の作業ならびに今後の計画について紹介した。

(7) ThermoCalc による状態図計算の紹介

東北大学工学部
西澤 泰二, 石田 清二, 大谷 博司

Thermo-Calc はスウェーデンの王立工科大学において開発された熱力学計算システムであり、その完成度の高さや熱力学データの充実度から考えて、文字通り世界一の規模をもつ統合化熱力学データベースと云える。この Thermo-Calc では、単に計算に必要な熱力学データがデータベース化されているだけでなく、多元系の状態図計算が可能な計算プログラム、熱力学パラメータの評価に用いられる最適化プログラム、あるいは計算結果を様々な形で表示できる描画プログラム等がモジュール化されて一つのシステムを構成している。利用者は一旦システムにアクセスすれば、異なるモジュール間の相互関係を全く意識せずに自由な発想で計算を行なう事ができる。今回は、このシステムを用いた状態図の計算例についていくつか御紹介した。

(8) SENKEN データベースの紹介

東北大学選研
徳田 昌則, 豊田 祥一

選鉱製錬研究所付属施設、難処理希少資源研究センターでは、製錬プロセスに関連するデータベース・システムの構築が一つの重要な活動目標である。最終的には素材プロセッシングに関する各種の数値データベースを完備し、高度なシミュレータの開発に利用し得るシステムを作り上げることである。その道程には三つの段階を考えている。第一の段階は、各種の個別的に開発されたデータベースや解析システムの有効性を評価し、当研究所の目的に沿うものを選択することである。第二の段階は、こうして集めた個別のデータベースや解析ソフトを必要な範囲で統合し、一つのまとまったシステムに再編することである。この段階で当研究所独自のデータベース・システムの基礎が固まる。その一方で当研究所独自のデータ蓄積を推進して内容を充実すると同時に、第三の段階として、これらのデータを各種のシミュレータと結合し、多様な素材プロセッシングに柔軟に対応できるシミュレータ・システムを作り上げることである。