

化学熱力学解析システムの開発

菖蒲 一久

産業技術総合研究所 生産計測技術研究センター

材料開発、化学プロセス、地質学、近年では有機系やバイオ、環境問題等々、熱力学的検討が有効な分野は多岐にわたる。熱力学解析は、その他、化学プラントの設計、腐食防食や環境問題、エンジン等の開発など多方面で行われているが、このような解析は、開発にかかる時間や人的コストも含め、開発コストの大幅なカットをもたらすので、その意味で非常に強力な武器となりうるものである。そのような解析を行うソフトは従来から多数開発されてきた。特に材料開発では Thermo-Calc や FactSage などがよく知られているが、これらの既存のものは幾つか問題があり、計算の信頼性もあまり高くなく、素人でも使えるようなものではない。また、近年では、解析に用いる熱力学データベースに対しては世界的に暗号化非公開の方向で進んでいるため、実利用で不可欠なデータベースの微調整や拡張などが難しくなっていることから、ほとんど外国製に頼っている我が国としては、国内産業界向けのデータベース整備が必要な状況になりつつある。このようなことから、本研究では、一般の材料研究者でも使える信頼性の高いソフトの開発と、実用的熱力学データベースの開発を行っている。さらに、その応用研究も始めており、共同研究などを通して、国内産業界の競争力向上に貢献していく。

化学熱力学解析システムの開発

ポイント

- 使いやすく高機能・高信頼性の化学熱力学解析ソフトとデータベースを開発
- 様々な課題に関する熱力学解析の技術相談、研究受託が可能
- 材料開発、生産プロセス、化学工学、環境問題など、様々な分野の研究開発に貢献

目的

材料研究、生産プロセス開発、化学工学、環境問題の研究など、従来から多くの分野で熱力学データベースとソフトを用いた複雑な化学熱力学の解析が行われています。しかし、従来のソフトでは、セラミックスや、ガス、水溶液などの系の計算に難点があり、信頼性が低く、使いにくいものでした。今回、これらの問題点を解決し、新規の熱力学解析ソフト (CaTCalc) を開発しました。更に、各種熱力学データベースも揃え、様々な課題解決に対応できる体制も整備しつつあります。今後、この熱力学解析技術により、様々な産業の発展に貢献していきます。

内容

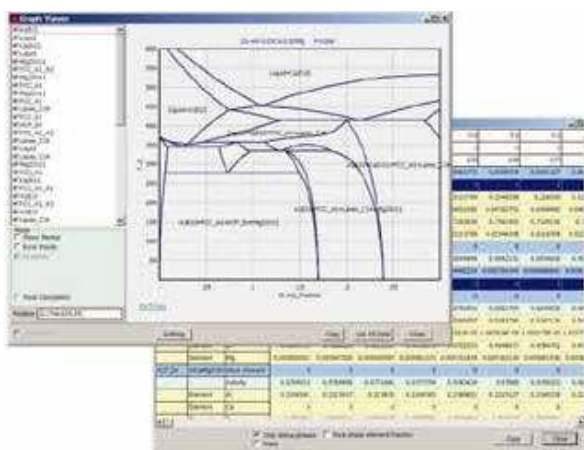
ガスやセラミックス等の化合物、水溶液などが関与する一般の化学熱力学計算の数値計算は、有限精度という基本的問題のため、実は正しく計算できない場合が多々ありました。本研究ではこの問題の解決に取り組み、信頼性の高い、新しい熱力学解析ソフトを開発しました。また、各種熱力学データベースも開発しつつあります。更に、このような技術シーズを元に、現在、金属系、セラミックス系、水溶液系などの複雑な熱力学解析と問題解決にも取り組みはじめており、既に幾つかの成果が得られつつあります。今後もこのような化学熱力学解析の利用拡大をはかっていきます。

連携可能な知財・技術

- 熱力学解析ソフト、熱力学データベースの開発
 - 金属系、セラミックス系、水溶液系のデータベースは一部開発済みで提供可能。また、高精度データベースの共同研究開発が可能です。
- 熱力学解析に関する共同研究開発
 - 化学反応が起こる系の解析。熱力学データベース開発を含む対応が可能。
 - 各種シミュレーション、モデリングソフト開発



元素とデータファイル、計算条件の設定画面



計算結果のグラフ表示とリスト表示

〈お問い合わせ先〉 (独)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
菖蒲 一久 k.shobu@aist.go.jp
Tel: 0942-81-3668 Fax: 0942-81-3696