

# CTC

Challenging Tomorrow's Changes

# Thermo-Calc Software

## Thermo-Calc概要

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態



熱力学平衡計算および状態図作成ツールです。  
多数の研究機関や大学・民間企業で利用されています。

## Thermo-Calc計算例

- ・ 相平衡計算（相の構成や、相分率、元素分配など）
- ・ 多元系状態図 ・ 液相面の計算 ・ 固溶度の計算
- ・ Scheilモデルによる凝固計算（冷却速度を考慮可能）

## 主な熱力学データベース一覧

- ・ 鉄合金 ・ Ni合金 ・ Al合金 ・ Ti合金
- ・ Mg合金 ・ Cu合金 ・ Si合金 ・ スラグ
- ・ 酸化物 ・ 水溶液 ・ はんだ材 ・ 高エントロピー合金

## Thermo-Calc拡張モジュール



### 拡散モジュール(DICTRA)

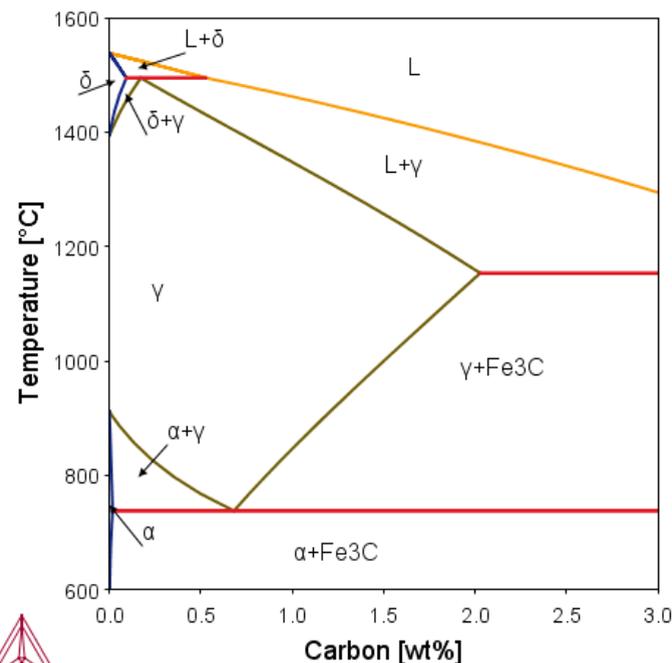
多成分系の拡散方程式を解き、  
拡散律速型変態を計算



### 析出モジュール(TC-PRISMA)

核生成・成長や結晶粒粗大化を計算

### Fe-C状態図



1. Thermo-Calc 概要
- 2. Thermo-Calc Software AB 概要**
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. データベースに収録されている材料特性
6. プロパティモデル
7. Thermo-Calcでできること
8. Thermo-Calc 関連モジュール
9. ライセンス形態



会社名：Thermo-Calc Software AB

所在地：スウェーデン、ソルナ

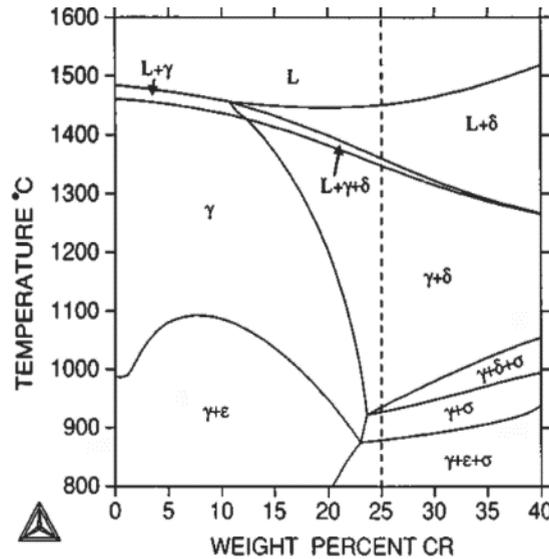
CEO：Dr. Anders Engström

設立 1997年

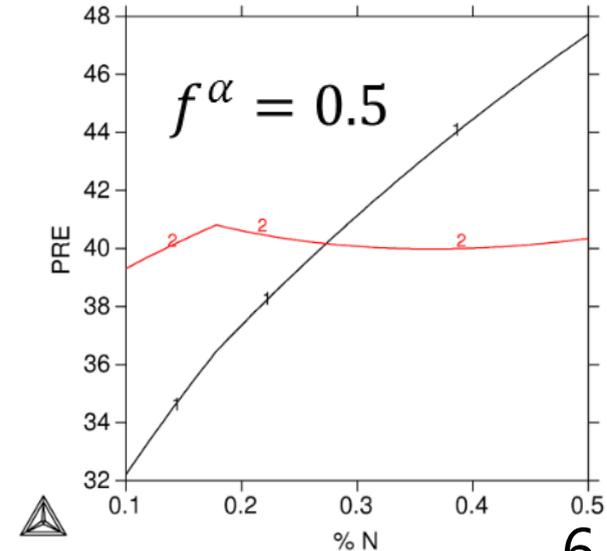
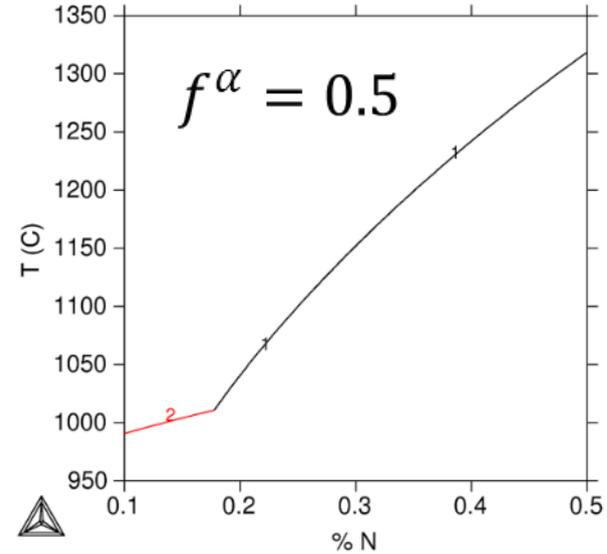
- スウェーデン王立工科大学から1997年に設立
- 1970年半ばよりスウェーデン王立工科における研究が設立起源
- SANDVIK（切削工具などの製造・販売）や日本製鉄は80年代半ばに本技術をいち早く採用
- ソフトウェア・データベースは60か国以上、1300以上のサイトで使用

## Business idea:

- 熱力学分野のソフトウェア、データベース、シミュレーション手法の開発及びそれらの販売
- 日本ではCTCが販売代理店・サポート対応



2 Computer calculated isopleth diagram above 800°C: dotted line corresponds to composition of super DSS



## Sandvik SAF 2507:

- Fe-25Cr-7Ni-4Mo(微量 Mn, N...)
- 80年代にSANDVIKが特許取得
- **計算材料設計 (CALPHAD法) により**  
**開発された世界初の鉄鋼材料**

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
- 3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係**
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

## CALPHAD(CALculation of PHase Diagram)計算状態図

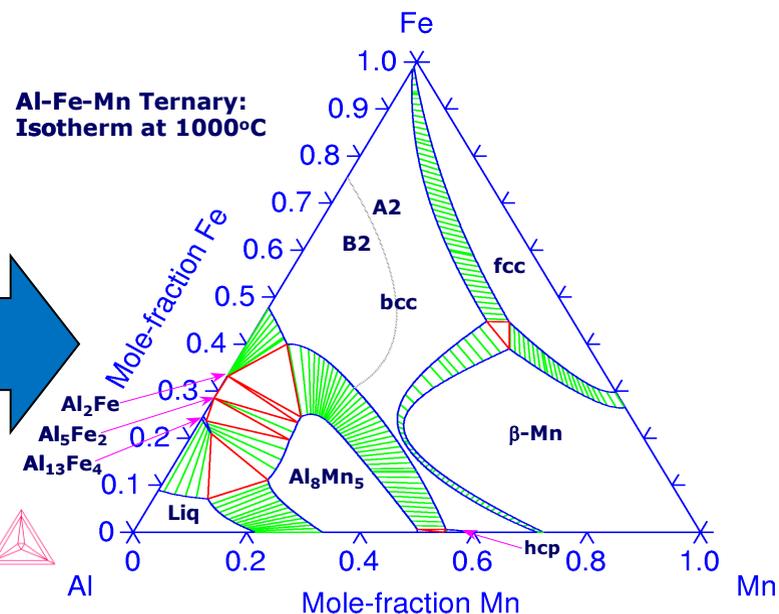
最小限の実験パラメータと熱力学理論を用いて相平衡状態図を作成する手法

- 最小限の実験情報
- 熱力学基礎理論
- 経験則

各相の熱力学的特性を表すモデル

$$G_m^\alpha = f(x, T, P)$$

モデルパラメータのデータベース化



二元系などで導出された熱力学パラメータを高次元系へと拡張し、  
実験のみでは困難な多元系状態図を作成可能

## 二成分系

ギブスエネルギーの線形和

$$G^\varphi = \underbrace{{}^0G^\varphi_A x^\varphi_A + {}^0G^\varphi_B x^\varphi_B}_{\text{ギブスエネルギーの線形和}} + \underbrace{RT(x^\varphi_A \ln x^\varphi_A + x^\varphi_B \ln x^\varphi_B)}_{\text{混合エントロピーに関する項}} + \text{EX}G^\varphi$$

${}^0G^\varphi_i$  : 成分iのGibbsエネルギー

$x^\varphi_i$  : 成分iのモル分率

混合エントロピーに関する項

$\text{EX}G^\varphi$  : 過剰Gibbsエネルギー

$$\text{EX}G^\varphi = L^\varphi x^\varphi_A x^\varphi_B$$

$L^\varphi$  : 相互作用パラメータ

$$L^\varphi = {}^0L^\varphi + {}^1L^\varphi (x^\varphi_A - x^\varphi_B) + {}^2L^\varphi (x^\varphi_A - x^\varphi_B)^2 + \dots$$

$${}^nL^\varphi = a + bT + cT \ln T + dT^2 + eT^3 + \dots$$

a, b, c, d, e: 実験などで導出

## 多成分系

$$G = \sum ({}^0G_i x_i + RT x_i \ln x_i) + \text{EX}G^\varphi$$

過剰ギブス自由エネルギー

(Redlich-Kisterモデル)

$$\text{EX}G^\varphi = \sum \sum x_i x_j \sum^v L_{ij} (x_i - x_j)^v$$

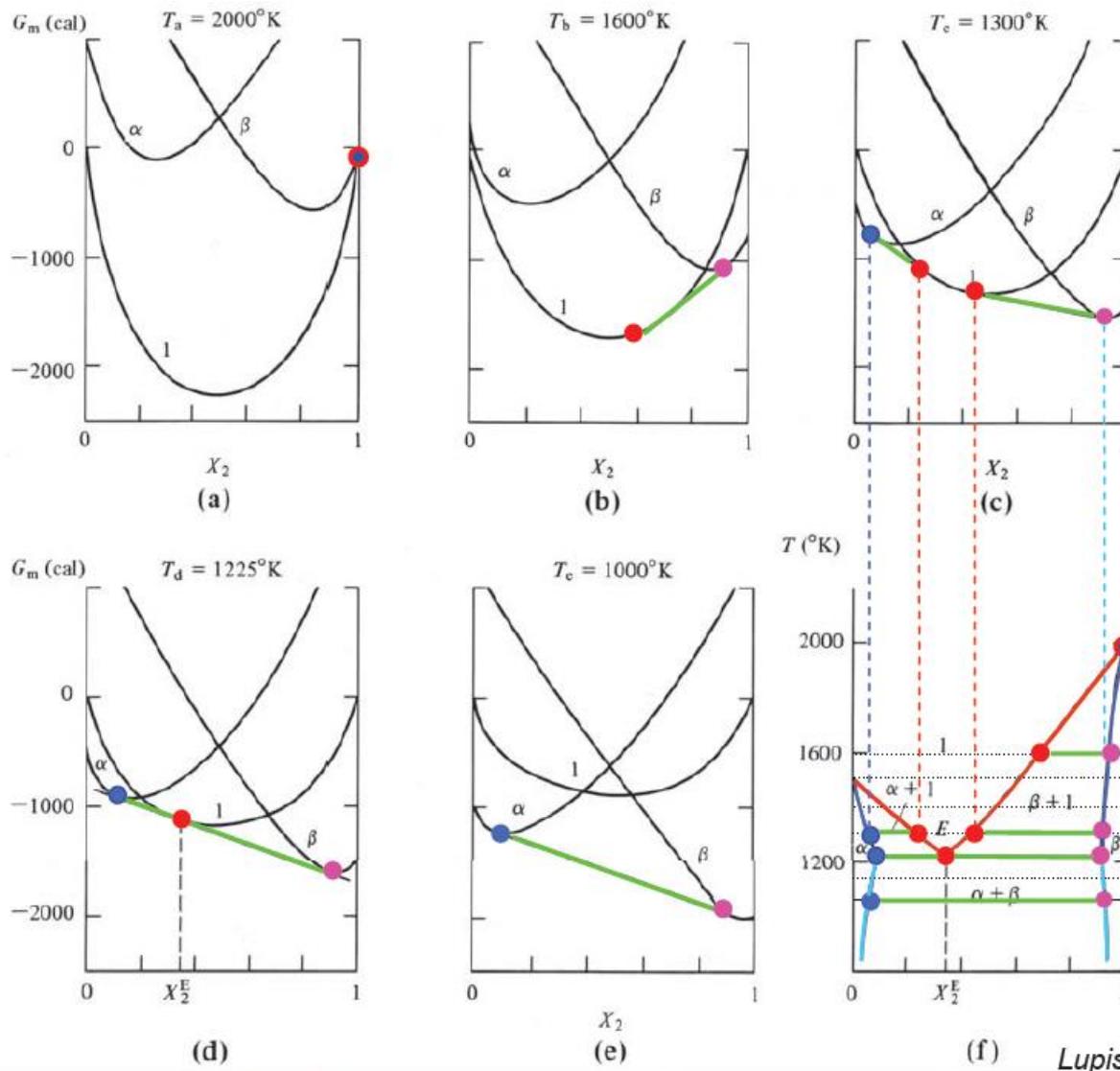
(Hillertモデル)

$$\text{EX}G_\varphi = x_1 x_2 x_3 (V_1 x L_1 + V_2 x L_2 + V_3 x L_3)$$

$$V1 = x_1 + (1 - x_1 - x_2 - x_3) / 3$$

$$V2 = x_2 + (1 - x_1 - x_2 - x_3) / 3$$

$$V3 = x_3 + (1 - x_1 - x_2 - x_3) / 3$$



— liquidus    — solidus    — solvus

Lupis Inden, MATGEN-IV, 2007

## 実験データ

相平衡熱力学データ

## 第一原理計算データ

安定/準安定相の  
熱力学データ

## 熱力学基礎理論

熱力学モデルに基づく  
各相の記述

## 熱力学モデリング

- 最小限の実験パラメータと熱力学理論を用いて状態図を作成する手法
- 二元系で決定した熱力学パラメータを多元系へと拡張可能



## CALPHAD 法

- 各合金系の熱力学データベースを用いて、CALPHAD法に基づく汎用的な熱力学平衡計算を行う

## 熱力学データベース

## 平衡計算結果

平衡計算で得られる  
計算結果(状態図など)

## 熱力学特性の結果

熱物性値：  
H, S, G, Cp,  $\mu$

## 凝固計算

Sheilモデルを用いた  
凝固計算

Thermo-Calcは種々の合金系データベースを用いた材料設計が可能

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
- 4. データベース**
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

- 熱力学データベースは**全ての計算に使用**
- 動力学データベースは**速度論の計算を行うモジュールなどに使用**

## Fe基合金

熱力学DB : **TCFE13**  
動力学DB : **MOBFE8**

## Ni基合金

熱力学DB : TCNI12  
動力学DB : MOBNI6

## Al基合金

熱力学DB : **TCAL9**  
動力学DB : **MOBAL8**

## Mg基合金

熱力学DB : **TCMG7**  
動力学DB : MOBMG2

## Cu基合金

熱力学DB : **TCCU6**  
動力学DB : MOBUC5

## Ti基合金

熱力学DB : **TCTI6**  
動力学DB : **MOBTI5**

## 高エントロピー合金

熱力学DB : **TCHEA7**  
動力学DB : **MOBHEA3**

## はんだ合金

熱力学DB : **TCSLD5**  
動力学DB : **MOBSLD2**

## Si基合金

熱力学DB : TCSI1  
動力学DB : MOBSI1

## Zr基合金

熱力学DB : TCZR1  
動力学DB : **MOBZR1**

## 貴金属合金

熱力学DB : **TCNOBL3**  
動力学DB : MOBNOBL1

## 汎用

熱力学DB : SSOL8, **SSUB7**  
動力学DB : MOB2

## 酸化物・スラグ

熱力学DB : **TCOX13**

## 超高温材料

熱力学DB : **TCUHTM2**

## 永久磁石材料

熱力学DB : **TCPMAG2**

## 超硬合金

熱力学DB : TCCC1

## 熔融塩

熱力学DB : **TCSALT1**  
熱力学DB : SALT1

## Mo基合金

熱力学DB : **TCMO1**  
動力学DB : **MOBMO1**

## Nb基合金

熱力学DB : **TCNB1**  
動力学DB : **MOBNB1**

## 水溶液

熱力学DB : TCAQ3, AQS2

## 地球化学

熱力学DB : GCE2

## 半導体

熱力学DB : SEMC2

## 核燃料

熱力学DB : MEPH20

## 核酸化物

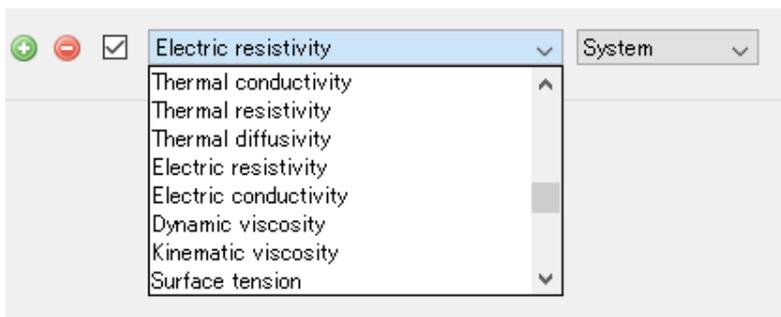
熱力学DB : NUCL20

※**赤字**は 2024a ,bで新規リリース/バージョンアップ  
※**青字**は 2023a, bで新規リリース/バージョンアップ

- 一部のデータベースには材料特性データを収録

## 計算可能な材料特性

- 粘性
- 熱伝導率
- 電気伝導率
- モル体積
- 表面張力
- 熱抵抗率
- 電気抵抗率



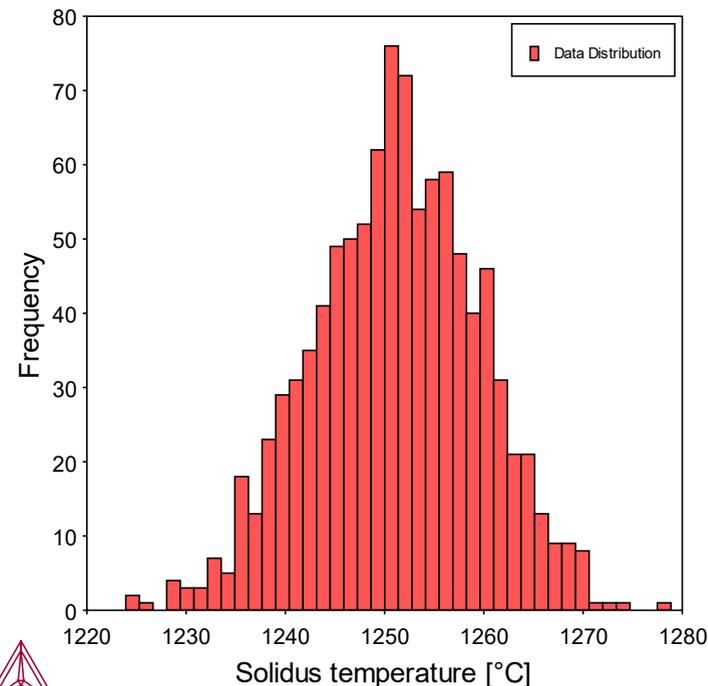
Thermophysical Properties	対応データベース
<b>粘度</b> Viscosity of Liquid	TCFE13, TCNI12, TCAL9, TCMG7, TCCU6, TCTI6, TCHEA7, TCSLD5, TCZR1, TCNOBL3, TCOX13, TCPMAG2, TCMO1, TCNB1
<b>表面張力</b> Surface Tension of Liquid	TCFE13, TCNI12, TCAL9, TCMG7, TCCU6, TCTI6, TCHEA7, TCSLD5, TCZR1, TCNOBL3, TCOX13, TCPMAG2, TCMO1, TCNB1
<b>熱伝導率</b> Thermal Conductivity	TCFE13, TCNI12, TCAL9, TCMG7, TCCU6, TCTI6, TCHEA7, TCSLD5, TCNOBL3, TCMO1, TCNB1
<b>電気抵抗率</b> Electric Resistivity	TCFE13, TCNI12, TCAL9, TCMG7, TCCU6, TCTI6, TCHEA7, TCSLD5, TCNOBL3, TCMO1, TCNB1, TCOX13(イオン液体)

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

- 事前に定義されたモデルを使用した計算が可能
- Thermo-Calcに標準で搭載

## 計算モデル

- 粗大化
- 相変態
- 駆動力
- 界面エネルギー
- 平衡
- 液相線・固相線温度
- 降伏応力
- クラック感受性係数
- T0温度
- スピノーダル
- 凍結温度での平衡特性



718合金の規格の範囲においてランダムな組成で計算した固相線温度の分布

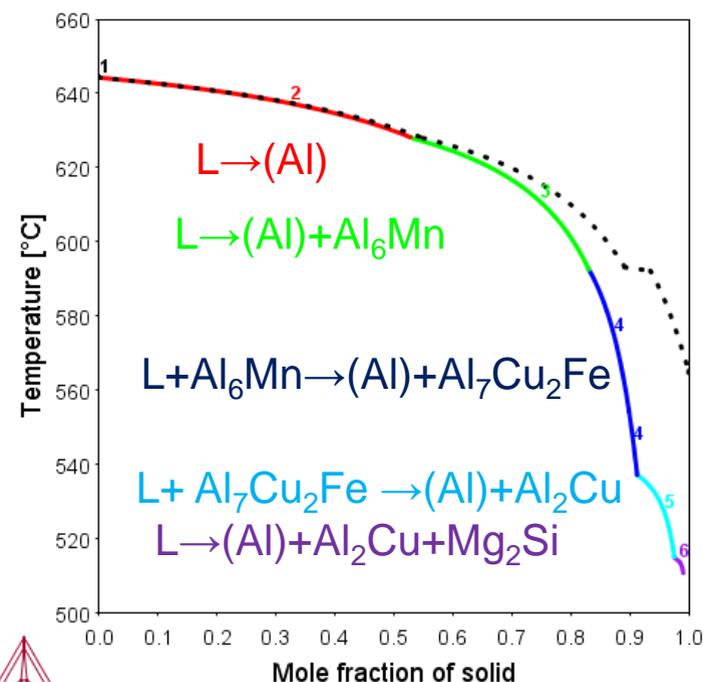
## Scheilモジュールによる凝固シミュレーション

- Scheilモジュールでは、降温に伴い液相から出現する固相を計算
- Scheilモジュールにおける計算条件
  - ・液相内の拡散は速い
  - ・固相内の拡散は無い
  - ・液相から出現する固相は平衡
 であることを仮定して、凝固過程を近似的に計算

- **組織形成過程（順序）や相変態温度を評価することが可能**

- 高速拡散元素、逆拡散、急速凝固を考慮するオプション機能

A206合金(Al-4.58Cu-0.28Mg-0.51Fe-0.07Si-0.003Mn wt%)  
のScheil計算



H.-L. Chen, "Thermodynamic modeling of metastable precipitate phases in Al-Cu, Al-Fe, Al-Mg-Si, and Al-Mg-Zn based alloys" (Stockholm, Sweden, 2014), unpublished work.

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
- 6. Thermo-Calcでできること**
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

- 任意の合金系における平衡状態や材料特性の予測が可能
- 拡張モジュールにより適用範囲の拡大が可能

## Thermo-Calc Software

### 平衡計算

平衡相, 多元系状態図, 準安定相, パラ平衡, 駆動力, エンタルピー, 固溶限, 液相/固相面, 比熱, 潜熱, ポテンシャル図, 電位-pH図, 凝固過程...

### 体積

密度, 熱膨張係数

### 液相の特性

表面張力, 粘性

### プロパティモデル

液相/固相温度, 界面エネルギー, 割れ感受性係数, 降伏応力, T0温度, スピノーダル, 凍結温度での平衡特性, 柱状晶-等軸晶遷移, ...

### 電気特性

電気抵抗, 電気伝導

### 熱特性

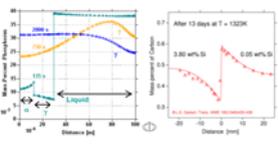
熱抵抗, 熱伝導

## + 拡張モジュール

### 拡散モジュール DICTRA

#### 適用例

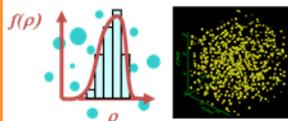
浸炭, 窒化, 接合, 均質化, 凝固, 化合物の成長・消失, ミクロ偏析...



### 析出モジュール TC-PRISMA

#### 計算機能

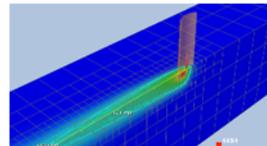
粒径分布, 数密度, 平均粒径, 体積分率, 降伏応力, TTP曲線, CCP曲線...



### AMモジュール

#### 適用例

AMプロセスにおける温度分布, 溶融池形状, 溶融池の物性の評価...



### 冶金プロセスモジュール

#### 適用例

BOF, アーク炉, LF, ...

### 鉄鋼向けプロパティモデル

#### 計算機能

TTT, CCT曲線, 変態点, 強度, ...

### Ni合金向けプロパティモデル

#### 計算機能

APBエネルギー, ひずみ時効割れ, ...

### Ti合金向けプロパティモデル

#### 計算機能

合金強度, マルテンサイト温度, ...

### プログラミングインターフェース

#### SDK

- TC-Python (Python)
- TQ-interface (Fortran)
- TC-Toolbox (MATLAB)



## 合金別事例と応用事例をWEBページに公開中

<https://www.engineering-eye.com/THERMOCALC/case/>

### 合金別適用事例

---

▶ 鉄合金

---

▶ アルミニウム合金

---

▶ マグネシウム合金

---

▶ ニッケル合金

---

▶ チタン合金

---

▶ 銅合金

---

•  
•  
•

<https://www.engineering-eye.com/THERMOCALC/case02/>

### 応用事例

---

▶ 金属積層造形

---

▶ 均質化・溶体化

---

▶ 析出

---

▶ 凝固・ casting

---

▶ 溶接・接合

---

▶ 腐食

---

•  
•  
•

合金別の事例紹介WebinarをYouTubeに公開中

[https://www.youtube.com/watch?v=a1HEdAIDZ\\_U&list=PLm8GCvv5-OYoCKfL-nnGHd7xF38gamrhV](https://www.youtube.com/watch?v=a1HEdAIDZ_U&list=PLm8GCvv5-OYoCKfL-nnGHd7xF38gamrhV)

## アジェンダ



### 1. 本日使用のソフトウェア

### 2. 計算事例 (9例)

1. 状態図, Al-Si-Mn
2. プロパティ図
3. 凝固計算 (凝固組織の形成), A206合金
4. 凝固割れ感受性評価, AA7075
5. 凝固割れ感受性評価, AA3000
6. 凝固計算における逆拡散モデル, AA7075
7. 溶体化・均質化処理, Al-Si合金
8. 溶体化・均質化処理 / 時効処理, 6005
9. 電気抵抗率, Al-Mg

### 3. MICRESSの紹介 Al合金への適用事例

最適合金設計・熱処理プロセスへの熱力学計算ソ...  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) - 1/7



- ▶ **【Thermo-Calc】アルミニウム合金, 最適合金設計・熱処理プロ...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 28:02
- 2 **【Thermo-Calc】鉄合金, 最適合金設計・熱処理プロセスへの熱...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 21:48
- 3 **【Thermo-Calc】銅合金, 最適合金設計・熱処理プロセスへの熱...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 34:49
- 4 **【Thermo-Calc】ニッケル基超合金, 最適合金設計・熱処理プロ...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 32:37
- 5 **【Thermo-Calc】チタン合金/マグネシウム合金 (軽金属), 最...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 27:07
- 6 **【Thermo-Calc】高エントロピー合金, 最適合金設計・熱処理プ...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 27:11
- 7 **【Thermo-Calc】アルミニウム合金 第二回, 最適合金設計・熱処...**  
伊藤忠テクノソリューションズ(CTC) 26:52

0:06 / 28:01



1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
- 7. Thermo-Calc 関連モジュール**
8. ライセンス形態

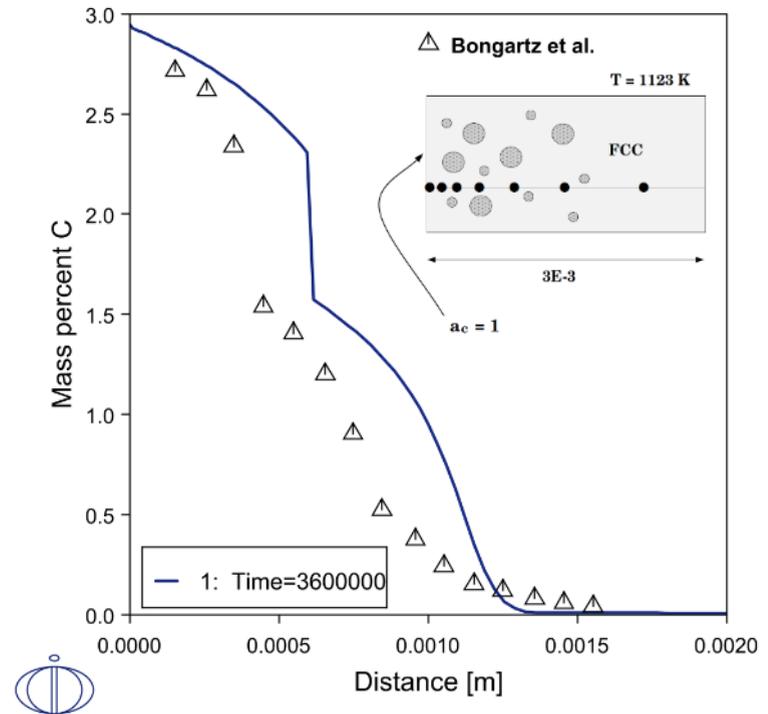
1. **拡散計算モジュール DICTRA**
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

## 多成分系の一次元の拡散や拡散に伴う変態を解析する Thermo-Calcの拡張モジュール

### 適用例

- 鋼の $\gamma$ - $\alpha$ 変態
- チタンの $\beta$ - $\alpha$ 変態
- 浸炭・脱炭
- 窒化
- 水素侵入・脱水素
- 均質化
- 化合物の成長、粗大化、消失
- ミクロ偏析
- 凝固
- 溶接、接合
- 拡散対

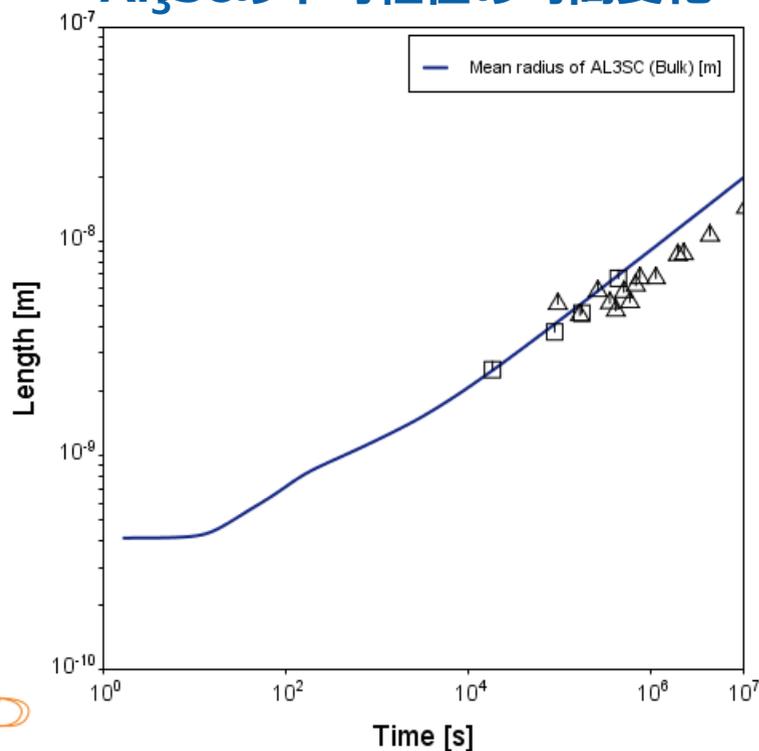
### Ni-Cr-C合金における 浸炭シミュレーション後の 炭素濃度プロファイル



1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

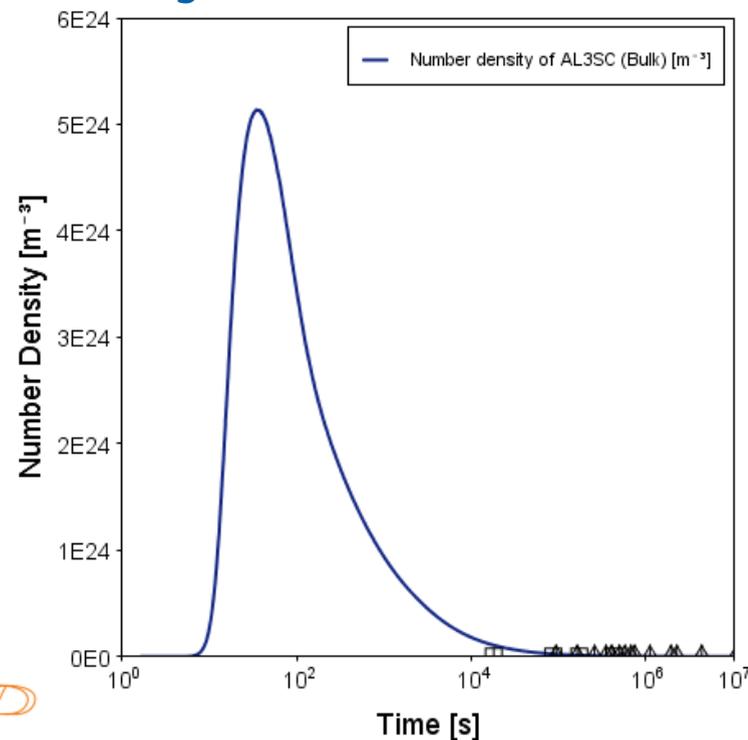
多元系における第二（析出）相の核生成、成長、粗大化を計算、解析するThermo-Calcの拡張モジュール

### Al<sub>3</sub>Scの平均粒径の時間変化



P

### Al<sub>3</sub>Scの数密度の時間変化



P

## 入力データ

- ・合金組成
- ・温度
- ・熱処理時間
- ・熱力学データ
- ・動力学データ
- ・界面エネルギー
- ・核生成サイト
- ・初期構造

## TC-PRISMA



## 出力データ

- ・粒径分布
- ・平均粒径
- ・臨界半径
- ・数密度
- ・体積分率
- ・母相中の組成
- ・核生成速度
- ・TTT線図
- ・CCT線図
- ・降伏応力

1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. **Additive Manufacturingモジュール**
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

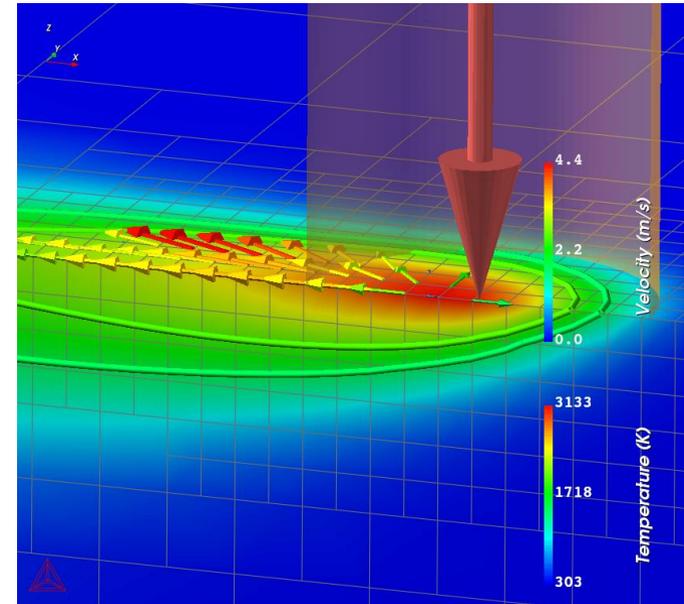
## Additive Manufacturing モジュール

- Thermo-Calc 2023bよりリリース

- **対象**：レーザ粉末床溶融結合法（LBPF）
- **用途**：積層造形プロセスに関する評価・予測
  - 溶融池（メルトプール）形状
  - 溶融状況
  - 時間変化を伴う温度分布
- **拡張性**：TC-PRISMAやDICTRAとの連携
  - 出力される温度分布を用いた析出・拡散の計算
- **データベース要件**：

以下にリストされているバージョン以降のデータベースで使用できます。

- TCFE13、TCNI12、TCMG6、TCCU6、TCTI5、TCNOBL3、TCHEA6、TCAL9、TCSLD5、TCMO1、TCNB1



## Scheil Calculation

### 材料データ設定



- AMプロセス計算に必要な材料データをScheil計算で生成・取得
- 蒸発～室温までの材料特性を計算
- エンタルピー, 熱容量, 密度, 熱伝導率, 粘度, 表面張力, 体積, 蒸発駆動力など

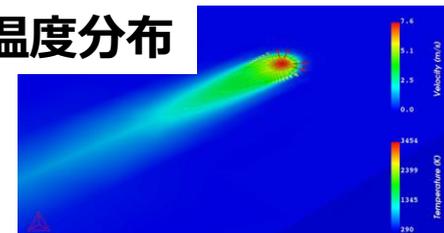
## AM Module

### AMプロセス計算

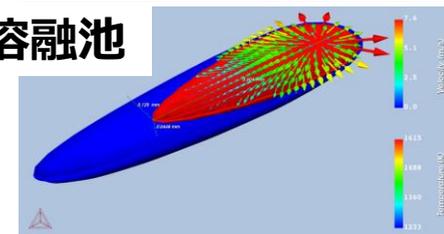


- 計算タイプ：
  - Steady-state
  - Transient
- 造形パラメータ：
  - ジオメトリ
  - レーザ出力・吸収率
  - 走査速度
  - ベースプレート温度 など

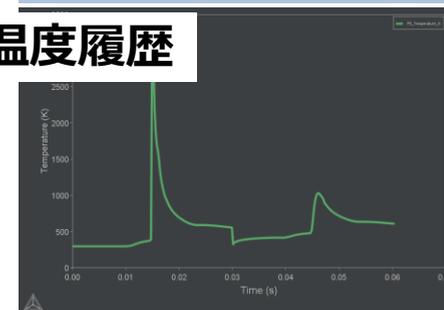
### 温度分布



### 溶融池

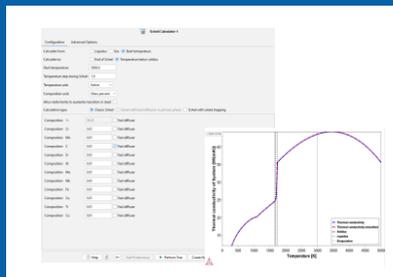


### 温度履歴



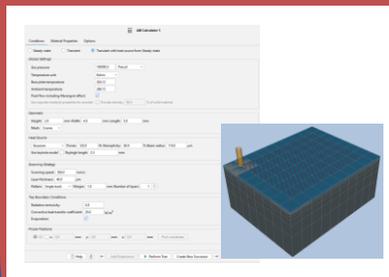
**材料データの手入力は不要で、造形パラメータを考慮したAMプロセスを計算**

## 材料データ設定 /Scheil計算



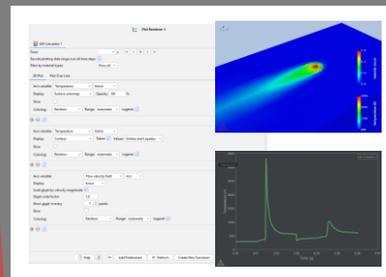
- 合金系定義,  
熱力学・熱物性  
データの取得
- Scheil計算で  
取得:  
エンタルピー, 熱容量,  
密度, 熱伝導率, 粘度,  
表面張力, 体積,  
蒸発駆動力 など

## AMプロセス計算



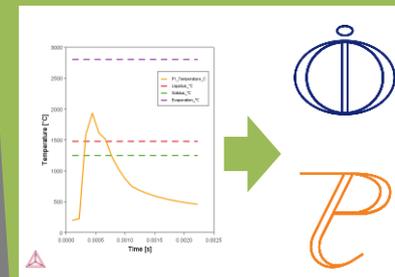
- AM計算設定:  
レーザ出力, 走査速度,  
層厚, ベースプレート  
温度
- 以下を考慮:  
熱伝導と流体流れ,  
粉末密度, 放射/対流/  
蒸発による熱損失

## ポスト処理



- 3D可視化:  
選択したライン/点の  
時間変化を可視化
- プロット可能な  
量:  
温度, 流束, 表面張力,  
熱伝導率, 動的粘度,  
溶融池寸法,  
プロセスマップ など

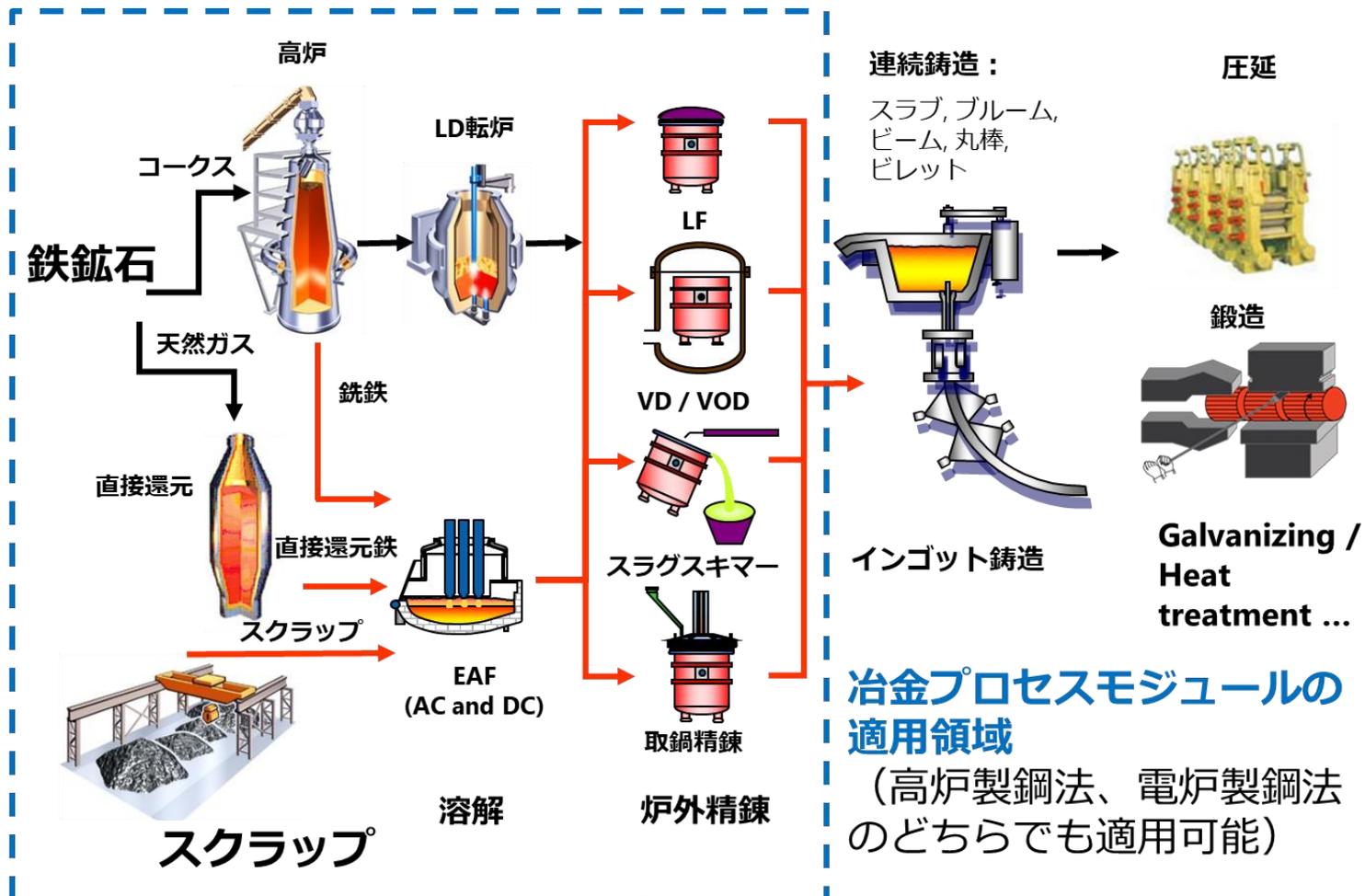
## 他モジュールと連携

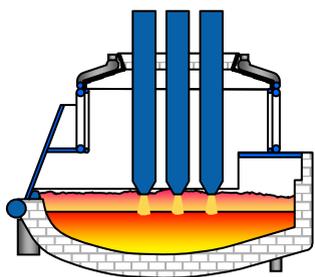


- 他モジュールと  
連携:  
DICTRAやTC-PRISMA  
との連携可能
- 他計算ソフトと  
連携:  
温度-時間分布や溶融池  
寸法、空間内の温度分布  
などを出力

1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

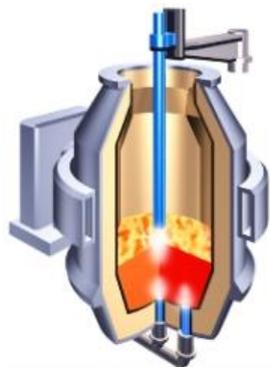
- 精錬過程におけるスラグと溶鋼の反応を解析可能
- 酸化物データベースTCOX8以降のデータベースにライセンスが無償で付属





## EAF(電気炉)

- 加熱
- 熔融
- 脱リン



## LD・BOF(転炉)

- 脱炭素
- 不純物除去

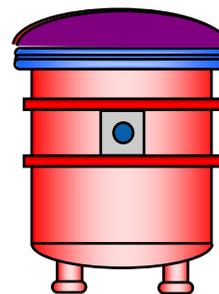
例題ファイル：  
[Ex-4a-BOF\\_DEMO](#)  
[Ex-4b-BOF\\_TCOX](#)



## Tapping (出鋼)

- 溶鋼の脱酸
- 成分調整

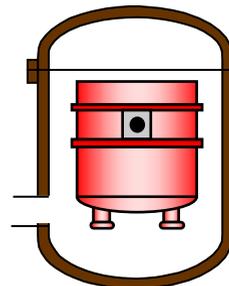
例題ファイル：  
[Ex-6a-Al\\_and\\_Si\\_killing\\_DEMO](#)  
[Ex-6b-Si-Mn\\_and\\_Al-Ca\\_killing\\_TCOX](#)



## LF (炉外精錬炉)

- 溶鋼の脱硫
- 非金属介在物の除去

例題ファイル：  
[PMET\\_06\\_Ladle\\_Furnace\\_Kinetics](#)



## VOD (真空酸素脱炭):

- 溶鋼の脱炭 (水素, 窒素)
- 非金属介在物の除去

例題ファイル：  
[PMET\\_07\\_Vacuum\\_Oxygen\\_Decarburization\\_Kinetics](#)

プロセス別に例題ファイルが用意されており、DEMO版データベースでも動作可能な例題もあり

TCOXデータベースや冶金プロセスモジュールの紹介セミナーの動画をYouTubeに公開中

<https://www.youtube.com/watch?v=uVBtuRdIItM>

## 1. BOF(転炉)プロセス

### 【Thermo-Calc】冶金プロセス予測計算...

### BOFプロセス:

- 高炉過程で生成された溶銑（高い炭素含有量）に酸素を吹き込み、炭素をCO<sub>2</sub>かCOとして脱炭素し、溶銑中の炭素量を減らす工程

### 不純物の除去:

- 製錬においてSとPの除去が重要だが、BOFは酸化条件のため、Pの除去は可能だが、Sの除去は困難

2[P] + 5[O] → (P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) or

2[P] + 5(FeO) + 4(CaO) → (Ca<sub>4</sub>P<sub>2</sub>O<sub>9</sub>) + 5[Fe]

→ 酸化条件

---

(CaO) + [S] → 2(CaS) + [O]

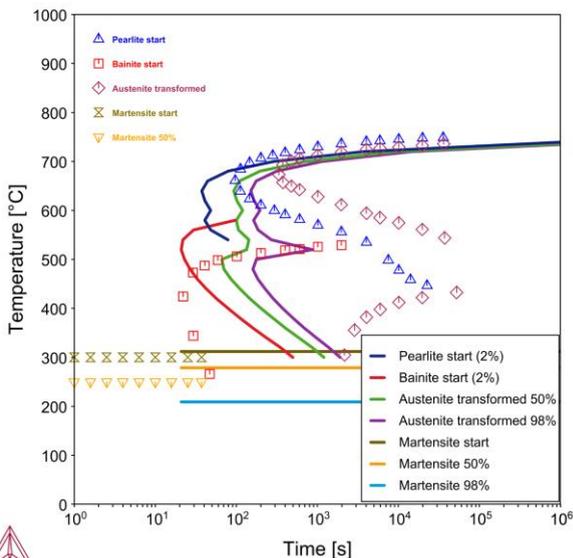
→ 還元条件

10:32 / 31:26

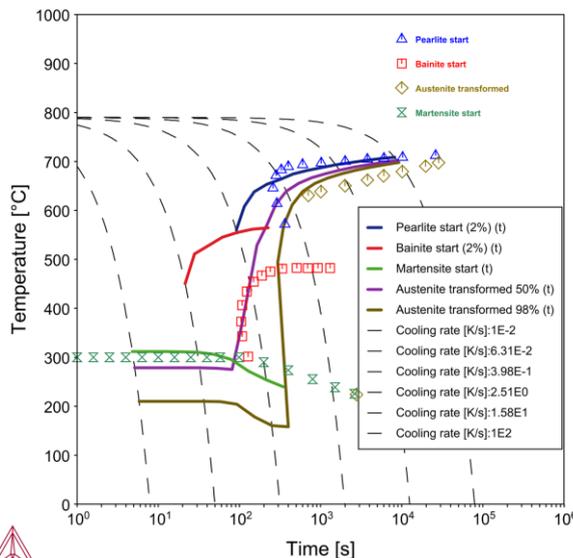
1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

- フェライト、マルテンサイト、パーライト、ベイナイトの計算モデルを使用することでTTT線図、CCT線図の計算が可能
- 鉄鋼における各変態点やマルテンサイト鋼強度の計算が可能  
ex) 液相線, 固相線, A0, A1, A2, A3, A4, Acm, Ms

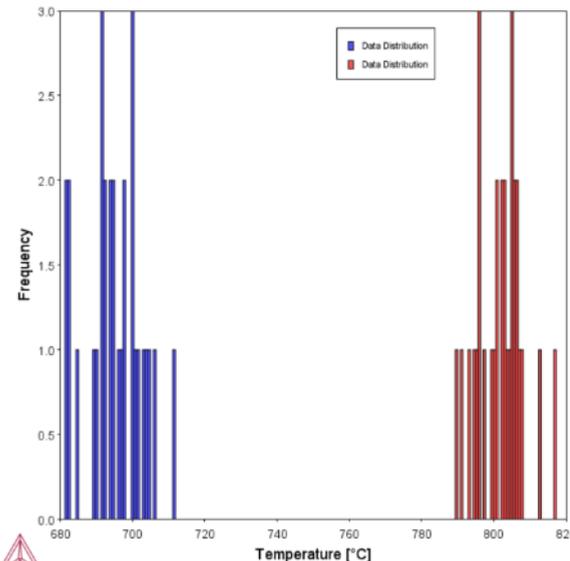
Fe-C-Mn-Si-Cr-V合金における  
恒温変態(TTT)曲線図



Fe-C-Mn-Si-Cr-V合金における  
連続冷却変態(CCT)曲線図



低合金鋼の規格の範囲で  
計算したA1点とA3点の分布



\*鉄鋼向けプロパティモデルを使用するにはTCFE9 + MOBFE4 以降のライセンスが必要です。

## 逆位相境界 (APB) エネルギー

- 規則相の $\gamma'$ 相に対する逆位相境界エネルギーを計算

例題 PM\_Ni\_02\_Antiphase\_Boundary\_Energy\_of\_Gamma\_Prime.tcu(GUI)

## 凍結温度における平衡特性

- 指定した凍結温度で平衡計算を行った際の組織を保ちつつ、異なる温度での材料特性を評価

例題 PM\_Ni\_01\_Lattice\_Parameter\_of\_Gamma\_Gamma\_Prime.tcu (GUI)

## 粗大化の速度定数

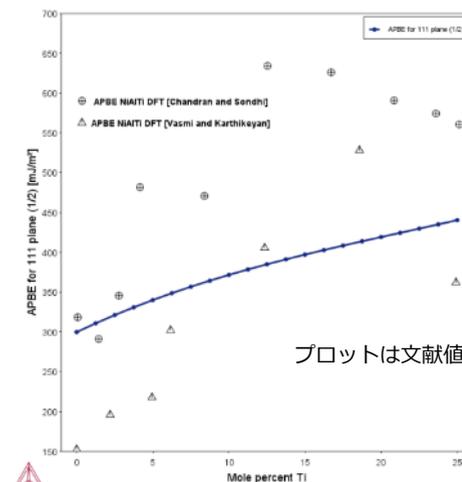
- 球状の析出物を仮定して、母相からの1つ以上の析出物における粗大化の速度定数を計算

## ひずみ時効割れモデル

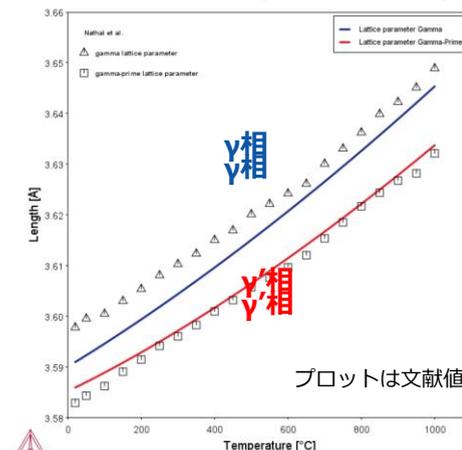
- $\gamma'$ と母相間に界面ひずみがある溶接や積層造形に関連し、 $\gamma'$ 体積分率、ミスフィットひずみをもとに割れのリスクを評価

例題 PM\_Ni\_04\_Strain\_Age\_Cracking (GUI)

Ti量-逆位相境界エネルギー



温度-格子定数(1000°Cで凍結)



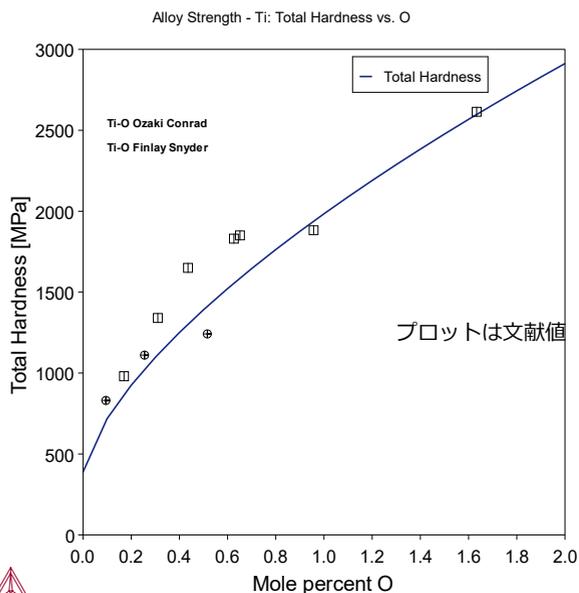
## 合金強度モデル

強度、硬度を計算 (固有の硬度、固溶体硬化、粒界硬化、析出硬化、およびユーザー定義の硬度をもとに計算)

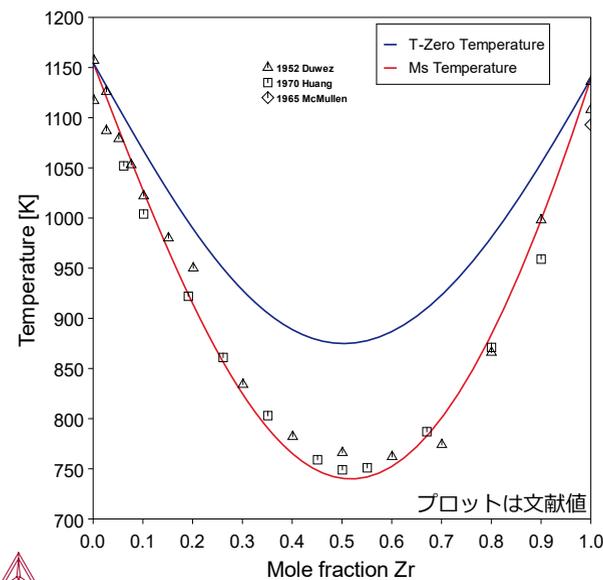
## マルテンサイト温度モデル

マルテンサイト開始温度(Ms)とT0温度を計算

### 硬度(Ti-O)



### マルテンサイト温度(Ti-Zr)



**\*Ti合金向けプロパティモデルを使用するにはTCTI6 以降のライセンスが必要です。**

1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

## ユーザが作成したプログラム中でThermo-Calcの各種計算を呼び出すためのPythonライブラリ

⇒大量の条件での計算やPythonライブラリ（数値計算、機械学習など）との連携が可能

### TC-Pythonで利用可能な計算機能

#### Thermo-Calc Software

##### 平衡計算

平衡相, 多元系状態図, 準安定相, パラ平衡, 駆動力, エンタルピー, 固溶限, 液相/固相面, 比熱, 潜熱, ポテンシャル図, 電位-pH図, 凝固過程...

##### 体積

密度, 熱膨張係数

##### 液相の特性

表面張力, 粘性

##### プロパティモデル

液相/固相温度, 界面エネルギー, 割れ感受性係数, 降伏応力, T0温度, スピノーダル, 凍結温度での平衡特性, 柱状晶-等軸晶遷移, ...

##### 電気特性

電気抵抗, 電気伝導

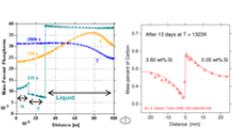
##### 熱特性

熱抵抗, 熱伝導

#### + 拡張モジュール

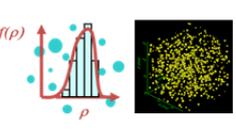
 **拡散モジュール**  
DICTRA

**適用例**  
浸炭, 窒化, 接合, 均質化, 凝固, 化合物の成長・消失, ミクロ偏析...



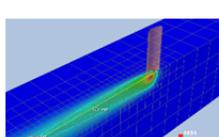
 **析出モジュール**  
TC-PRISMA

**計算機能**  
粒径分布, 数密度, 平均粒径, 体積分率, 降伏応力, TTP曲線, CCP曲線...



**AMモジュール**

**適用例**  
AMプロセスにおける温度分布, 溶融池形状, 溶融池の物性の評価...



**冶金プロセスモジュール**

**適用例**  
BOF, アーク炉, LF, ...

**鉄鋼向けプロパティモデル**

**計算機能**  
TTT, CCT曲線, 変態点, 強度, ...

**Ni合金向けプロパティモデル**

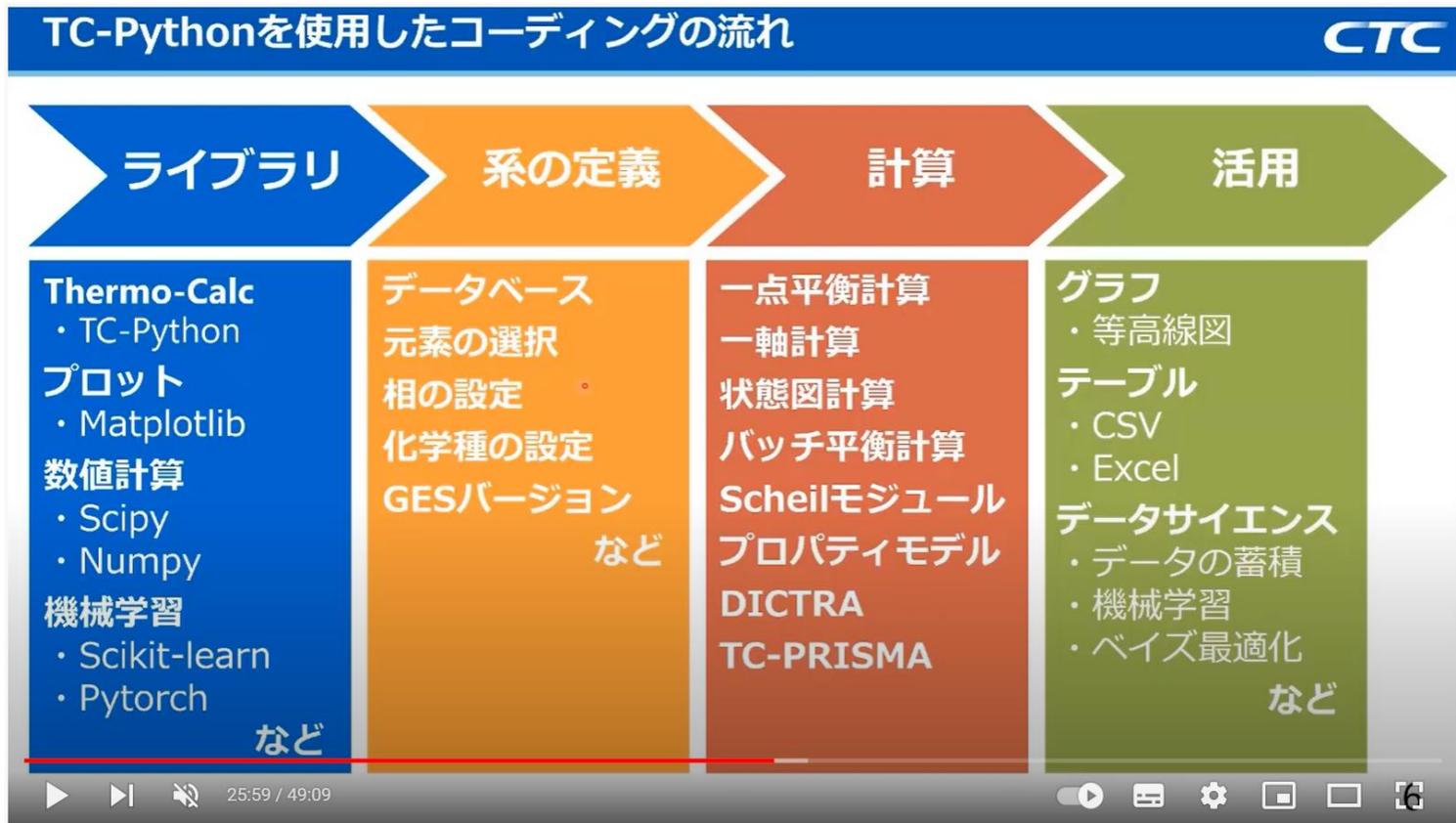
**計算機能**  
APBエネルギー, ひずみ時効割れ, ...

**Ti合金向けプロパティモデル**

**計算機能**  
合金強度, マルテンサイト温度, ...

TC-Pythonの紹介セミナーの動画をYouTubeに公開中  
(動画前半部はThermo-Calc ver.2021b リリース情報の紹介)

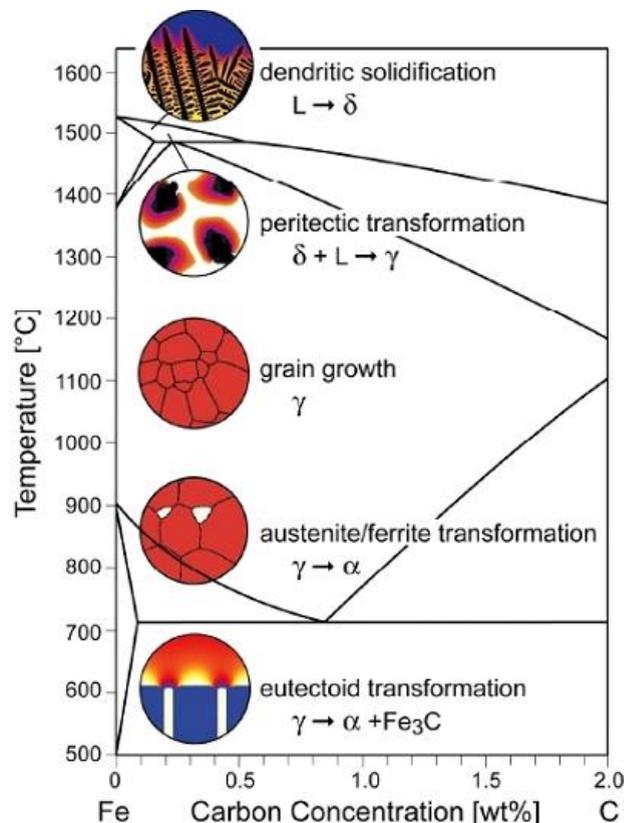
<https://www.youtube.com/watch?v=rCe6o8vEpmo&t=707s>



1. 拡散計算モジュール DICTRA
2. 析出計算モジュール TC-PRISMA
3. Additive Manufacturingモジュール
4. 冶金プロセスモジュール
5. 鉄鋼, Ni合金, Ti合金向けプロパティモデル
6. プログラミングインターフェース TC-Python
7. 合金組織予測ソフトウェア MICRESS

Thermo-Calc熱力学データと連携して、  
温度履歴や組成、濃度や結晶粒分布に応じた  
多様な合金組織のミクロ組織形成過程を解析するソフトウェア

➤ Fe-C系の各反応の組織変化の一貫計算



◆ 凝固 ( $L \rightarrow \delta$ )

◆ 包晶反応 ( $L + \delta \rightarrow \gamma$ )

◆ 結晶粒成長

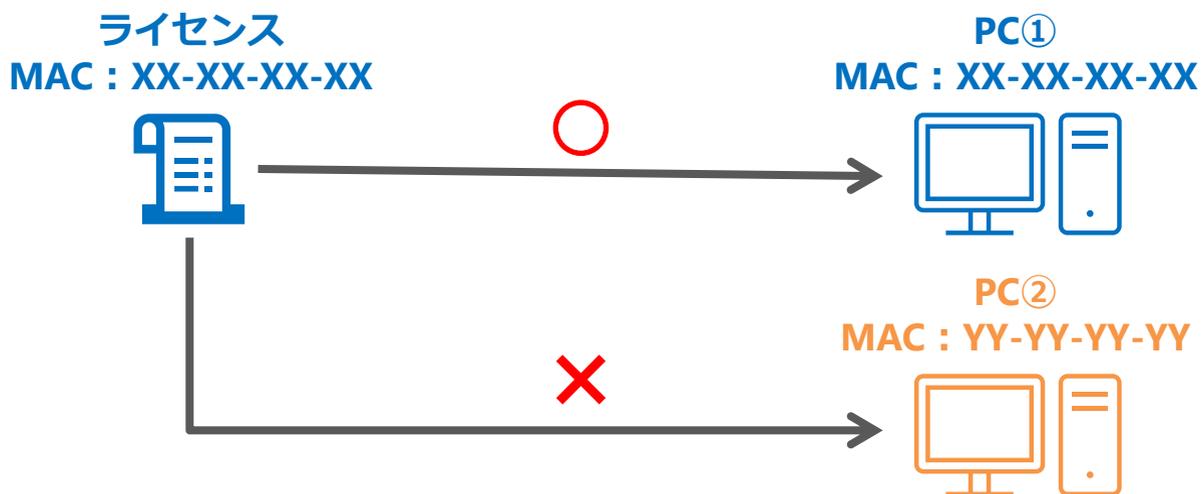
◆  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態

◆ 共析反応 ( $\gamma \rightarrow \alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ )

1. Thermo-Calc 概要
2. Thermo-Calc Software AB 概要
3. Thermo-CalcとCALPHAD法の関係
4. データベース
5. プロパティモデル
6. Thermo-Calcでできること
7. Thermo-Calc 関連モジュール
8. ライセンス形態

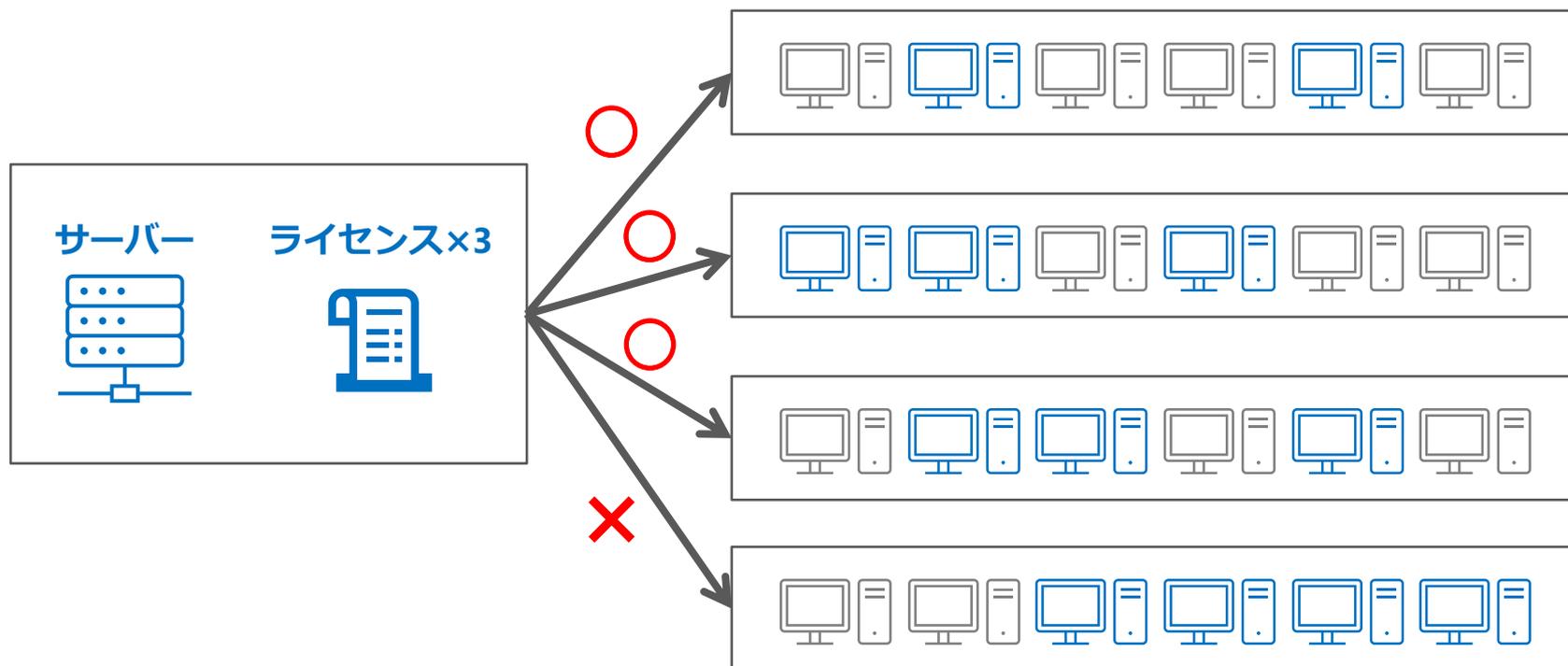
## ・ノードロックライセンス（スタンドアロンライセンス）

- 1台の特定のPCで利用する方式
- MACアドレスに紐づく
- 保守契約中であれば利用PCを変更可能



## • ネットワークライセンス

- 1台のサーバーでライセンスを運用する方式
- 任意の範囲のIPアドレスのPCであればどれでも利用可能
- 購入ライセンス数が最大同時利用数
- 保守契約中であればサーバーやIPアドレスの範囲を変更可能



# 伊藤忠テクノソリューションズ株式会社

科学システム本部

東京都港区虎ノ門4-1-1神谷町トラストタワー

E-mail.: [thermo-calc@ctc-g.co.jp](mailto:thermo-calc@ctc-g.co.jp)

URL: <http://www.engineering-eye.com/>