

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成15年度採択研究代表者

石田 清仁

(東北大学未来科学技術共同研究センター 教授)

「材料の組織・特性設計統合化システムの開発」

1. 研究実施の概要

本研究プロジェクトは、(A)エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション、(B)磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料および強磁性形状記憶合金のシミュレーション、(C)鉄鋼材料の材質予測シミュレーションを対象として、それぞれ以下の研究を実施する。

(A) エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション

近年の環境問題を背景として、半導体デバイスの接合材料として鉛フリーはんだの開発が急務となっている。本研究では、材料設計を支援する熱力学データベースの構築、および、接合界面の組織を予測するためのPhase-Fieldシミュレーション技術を開発して、合金設計と組織制御を行う。

(B) 磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料および強磁性形状記憶合金のシミュレーション

磁気記録媒体の更なる高密度化を目的として、Co基合金の熱力学データベースの構築と組織形成シミュレーションを実施する。また、ナノ軟質磁性材料については、Fe-B-Si-Cu-Co-Nb-Zr系合金の熱力学データベースを整備して、相平衡の計算と組織設計に活用する。さらに、強磁性形状記憶合金として、Ni-Fe-Ga系およびCo-Ni-Al系合金における状態図の熱力学的解析とマルテンサイト変態挙動を調査して、組織形成シミュレーション手法を開発する。

(C) 鉄鋼材料の材質予測シミュレーション

鉄鋼材料の材質を左右するマイクロアロイング技術を、熱力学に立脚した組織形成シミュレーションにより、具体的な対象として、ボロンを含むFe-C-B-Cr-Ni-Co-Ti系、硫黄を含むFe-C-S-Mn-Ni-Cr-Ti系、および、炭素と窒素を含むFe-C-N-Cr-Mn-Ni-Ti-Nb-V系の各種熱力学データベースを整備する。さらに、3種のデータベースを統合したマイクロアロイング鋼熱力学データベースを構築する。

いずれも、今後の社会基盤形成に不可欠な実用材料の開発を目指す先端技術であり、現行の研究体制における研究成果を集積することにより、早期の実用化が期待できる。

2. 研究実施体制

東北大学グループ

- ① 研究分担グループ長：石田 清仁（東北大学未来科学技術共同研究センター、教授）
- ② 研究項目：熱力学データベース，拡散データベース構築および力学的要素の導入法の開発

(独) 産業技術総合研究所グループ

- ① 研究分担グループ長：及川 勝成（サステナブルマテリアル研究部門、主任研究員）
- ② 研究項目：Fe-S基熱力学データベースの開発
Co基磁性薄膜用熱力学データベースの開発

(独) 物質・材料研究機構グループ

- ① 研究分担グループ長：小野寺 秀博（計算材料科学研究センター センター長）
- ② 研究項目：Phase-Field法による組織・特性予測法の確立

九州工業大学グループ

- ① 研究分担グループ長：長谷部 光弘（工学部 教授）
- ② 研究項目：
 - ・ ナノ軟磁性材料 (Fe-Si-B-Cu-Co-Nb-Zr、Fe-TM-B (TM=Zr、Hf、Nb) 系の熱力学パラメータ評価
 - ・ ナノコンポジット磁石 (Fe-B-Nd (Sm)-Co-Cu) 系の熱力学パラメータ評価
 - ・ 準安定炭化物相の第一原理計算

(株) 豊田中央研究所グループ

- ① 研究分担グループ長：中西 広吉（先進金属研究室 室長）
- ② 研究項目：Fe基耐熱合金開発におけるCALPHAD法活用
 - ・ CALPHAD法により、 σ 相、 γ' 析出量を最適化
 - ・ Scheil法によるミクロ偏析予測から casting ミクロポアを抑制