

「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

(東北大学大学院工学研究科 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

各種の先進機能材料および構造材料の持つ諸特性は、その内部組織に大きな影響を受ける事から、材料の機能を最大限に引き出すには特性を具現化するための組織制御が不可欠である。ナノからマイクロスケールに至る一連の内部組織を制御するための基本情報は状態図（相図）であるが、1980年代から著しい進展を遂げた第一原理的計算手法や実用材料をターゲットとするCALPHAD (Calculation of Phase Diagrams)法に代表される現象論的な計算手法の発展によって、単に状態図の予測や計算だけでなく、現在、組織形成を支配する自由エネルギーが定量的に推定できるようになっている。この様な進展により各方面の素材メーカーが状態図や熱力学の計算ソフトウェアを導入して、現在日常的に研究開発に利用しているが、これらのソフトウェアの大部分は平衡計算すなわち“スタティック”な扱

いであり、企業側からは速度論的な取り扱い、すなわち“ダイナミクス”を予測するソフトウェアの開発の要望が極めて大きい。平衡計算や速度論的計算については各々個々に多くの研究グループがあるが、両者

を組み入れて統合化する研究は個人研究では限界があるため、ほとんど行なわれていないのが現状である。そこで、本研究は、実用合金開発に直結するシミュレーション技術の

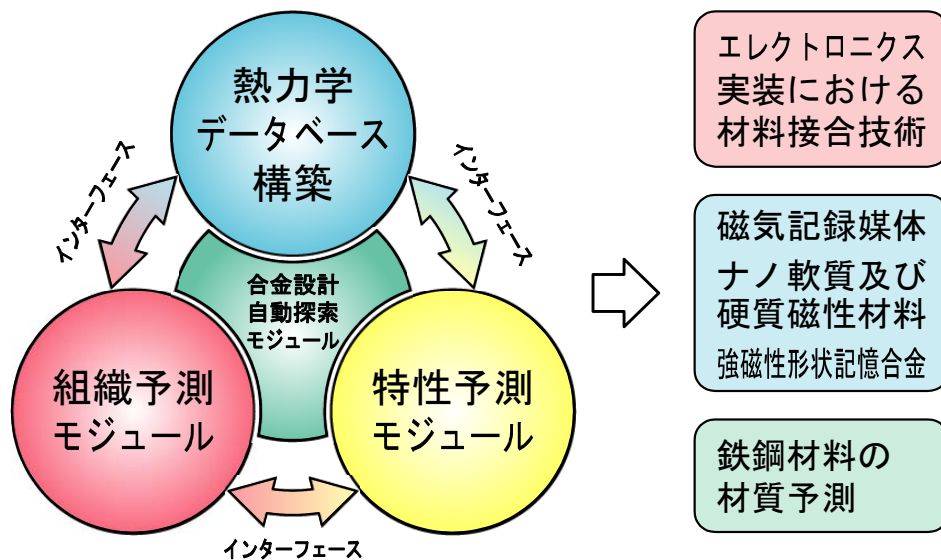


図1 プロジェクトの概要と研究対象

開発を目指し、共同でこの課題に挑戦するものである。そのために本研究では、熱力学データベース構築を目指す東北大学と九州工業大学、組織シミュレーションを行なう（独）物質・材料研究機構、磁気記録媒体材料の合金設計を行なう（独）産業総合研究所、熱力学データベースを販売・開発している（株）材料設計技術研究所、さらに各種シミュレーションを種々の材料開発にすでに適用している（株）豊田中央研究所及びJFEスチール（株）が参画し、産学による統合化システムの共同開発を行なう。

2. 研究実施内容

本研究の最終目標は図1に示す様に、汎用的な“材料の組織と特性を予測”する統合化システムの開発と、本研究の特徴でもある合金組成自動探索システムの開発である。あらゆる材料を対象とする汎用プログラムはすぐには作製できないので、社会的ニーズが大きくかつシミュレーションするためのデータベースや基本パラメータが整備されている具体的なターゲットに的を絞って研究に着手する。研究遂行に当たっては、熱力学データベース構築のための化学自由エネルギーと、組織予測を行なうための組織自由エネルギーの推定、さらに特性評価をシミュレートする必要があるが、図2に研究の全体像を示した。具体的な研究対象は次の通りである。

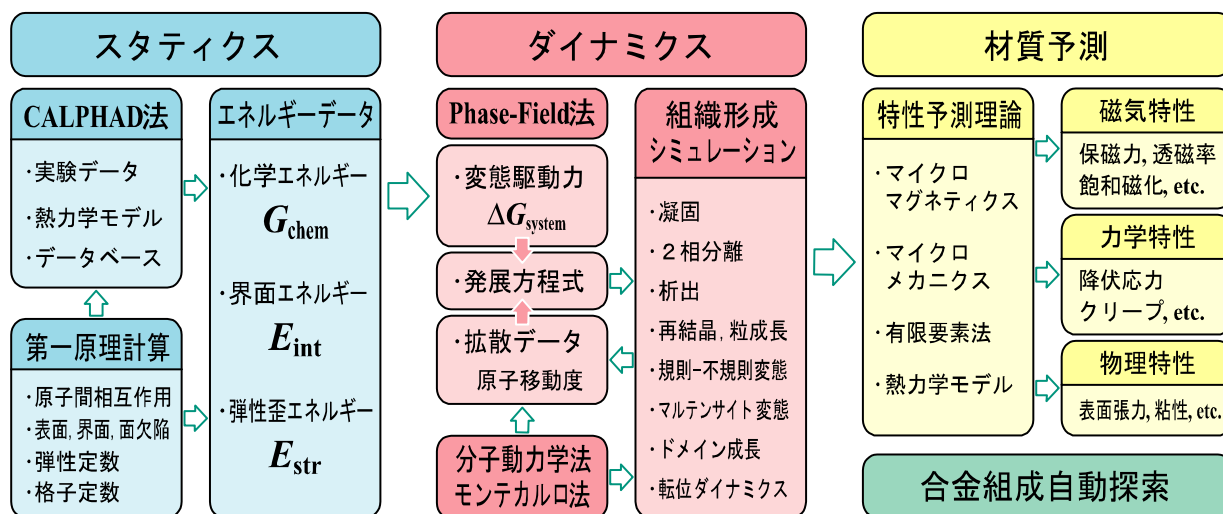


図2 シミュレーションの内容

(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

(i) マイクロソルダー材及びCu合金の熱力学データベース構築

本研究グループはすでに、Pb、Bi、Sn、Sb、In、Zn、Ag、Cuの8元素の相平衡や熱力学的性質を予測するデータベースを有しているが、これを更に充実させAl、Au、Niを含んだデータベース構築を行なう。本年度はこのための基本系としてSn-Au-Ni、Sn-Ni-Biを始め、いくつかの3元系の実験と解析を行った。またCu合金については現在Cu、Cr、

Ni、Sn、Fe、Zn、Siの7元素のデータベースを構築しているがこれにTi、Zr、Bを加えた大規模のデータベースを作成する。本年度はTiを加えたデータベース構築がほぼ完成した。

(ii) 合金組成自動探索システムの開発

従来使用されてきたPb-Sn系はんだは、Pb汚染の環境問題から使用が制限されるが、これに代わるPbフリーはんだの開発が急務となっている。このためには100~300°Cにわたる低温から高温への種々のはんだが必要である。このため融点はもちろん組織形態や偏析度を左右する固相と液相2相温度領域を予測する事をコンピュータで自動的に行なえるようなモジュールを作成する。さらにこの合金組成自動シミュレーションを用いて実際の材料開発を行なう事も視野に入れる。本年度は3元系の合金組成探索シミュレーションソフトの作成を行った。

(iii) PbフリーはんだとCu基板との反応予測シミュレーション

はんだ接合は通常Cu基板上行なわれるので、CuとPbフリーはんだとの界面反応がエレクトロニクス実装上極めて重要である。すなわち接合界面で、どのような化合物が生成されその界面は平滑か凹凸を呈したもののか、さらにどのような拡散経路か等が界面の強度や接合特性に直接影響するためである。この手法の開発にはPhase-field法が極めて有効である事をすでに確認しており、この手法をさらに拡張し、多元系PbフリーはんだとCu基板やNiメッキした基板との接合のシミュレーションが出来る様なソフトウェアの開発を行なう。本年度は代表的なPbフリーはんだであるSn-Ag-Cu合金の組織や共晶率をPhase Field法によって解析を行った。

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

(i) 磁気記録媒体用シミュレーション

磁気記録媒体材料としては、Co-Cr基金合金やFe-Pt合金の薄膜が用いられているが、いずれの系も本研究グループは熱力学データベースを構築中であり、Co-Cr 2元系では、一部薄膜の組織シミュレーションが可能な状況になっている。したがって今後さらに記録密度を向上させるためには、Co-Cr系に合金元素を添加した場合に、hcp相内での強磁性相と常磁性相内に合金元素がどのように分配し、それが薄膜の組織形成と磁気特性に与える影響を定量的に予測するシミュレーションの開発を行う。本年度はCo-Crと同様に磁気特性が期待できるCo-Mo及びCo-W系の磁気の相分離を実験的に確認するとともに熱力学解析を行い、さらに一部Phase Field法による組織形成シミュレーションを行った。

(ii) ナノ軟質及び硬質磁性材料

最近本邦で開発されたナノ軟質磁性材料(Fe-B-Si-Cu-Co-Nb-Zr系)は、世界で最高の性能を有するが、多くの元素が添加されているためその組織予測はこれまで不可能であった。しかし本研究グループはFe-B基系のデータベースを構築中であるので、このような多元合金の組織のシミュレーション化に挑戦する。さらにFe-Cr-CoやFe-Ni-Al-Co基

などのスピノーダル型硬質磁性材料の組織と磁気特性予測シミュレーションの開発を行う。本年度はFe-B-X系を中心とした解析を行った。

(iii) 強磁性形状記憶合金

強磁性形状記憶合金は外部磁場によって作動する新しい機能材料として、アクチュエーター、超磁歪材などへの適用が期待されている。本研究グループは、最近Co-Ni-Al系、Ni-Fe-Ga系など従来にない強磁性形状記憶合金を提案しており、本プロジェクトのシミュレーション技術をこれらの合金系にも適用して、さらに性能に優れた合金の開発や磁気、組織予測システムの開発を行う。本年度はNi-Fe-Ga系の相平衡を実験的に求め、それより最適組成範囲を決定するとともに、磁気特性や形状記憶特性について把握した。又代表的な強磁性形状記憶合金であるNi₂MnGa系の組織シミュレーションに着手した。

(C) 鉄鋼材料の材質予測シミュレーション

鉄鋼業は本邦の産業技術基盤でもあり、大手鉄鋼や特殊鋼メーカーが状態図や熱力学データベースを導入して材料研究に日常利用している。ただし“スタティック”な現象に対する応用が主なものであり、本研究で目指す“ダイナミック”な組織シミュレーションが鉄鋼材料で可能になればその波及効果ははかりしれない。鉄鋼材料の熱力学データベースは欧米で開発されたものもあるが、S、B等微量添加で大きな影響を及ぼすマイクロアロイリング元素は含まれていないため、実用鉄鋼材料への適用は限界がある。これに対し、本研究グループはこれらの元素を包括したデータベースを構築中であり、本研究で更に進展させるので、国際的に最も充実したものになると確信している。したがってこの優位性をさらに組織シミュレーションへ発展させ、機械的性質を始めとする各種特性予測シミュレーションの開発に挑戦する。本年度はFe-C系における球状化過程のシミュレーション及びパラ平衡を考慮したTTT曲線の解析を行った。

3. 研究実施体制

東北大学（石田）グループ

- ① 研究分担グループ長：石田 清仁（東北大学大学院工学研究科、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及びそれを利用した合金設計

東北大学（安斎）グループ

- ① 研究分担グループ長：安斎 浩一（東北大学大学院工学研究科、教授）
- ② 研究項目：鉛フリーはんだ合金のフロープロセス解析

東北大学（小池）グループ

- ① 研究分担グループ長：小池 淳一（東北大学大学院工学研究科、教授）
- ② 研究項目：ナノ領域における力学特性評価法の確立とGUI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：鉄鋼材料中に生成する $Ti_4C_2S_2$ の生成自由エネルギーの確立

(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：
 - ・ Fe-Si-B, Ni-Si-B 3元系の熱力学パラメータおよびアモルファス形成能の評価
 - ・ Sn-Zn-X系鉛フリーはんだ合金の熱力学パラメータの評価
 - ・ 準安定炭化物相の熱力学量の第一原理的評価

(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：鉄鋼の相変態シミュレーション

JFEスチール(株)グループ

- ① 研究分担グループ長：占部 俊明 (スチール研究所 主任研究員)
- ② 研究項目：「Phase Field法を用いた鋼の炭化物の組織形成に関するシミュレーション技術の確立」
本年度：パーライト組織の球状化過程のPhase Field計算手法の確立
Fe-C二元系でのパーライトコロニー内のラメラ組織の変化をPhase Filedシミュレーションにより再現し、実験組織との比較検討を行った。

4. 主な研究成果の発表 (論文発表および特許出願)

(1) 論文発表

<東北大学石田グループ>

- C. P. Wang, X. J. Liu, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic Database of the Phase Diagrams in Copper Base Alloy Systems", J. Phys. Chem. Solids, 66 (2005) 256-. 260.
- M. Jiang, C. P. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, K. Kainuma, G.P. Vassilev and K. Ishida, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Cu-Ni-Zn System", J. Phys. Chem. Solids, 66 (2005) 246-250.

- P.J. Brown, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, K-U. Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck, "Crystal Structures and Phase Transitions in Ferromagnetic Shape Memory Alloys Based on Co-Ni-Al and Co-Ni-Ga", *J. Phys. Condens. Matter.*, 17 (2005) 1301-1310.
- N. Koeda, T. Omori, Y. Sutou, H. Suzuki, M. Wakita, R. Kainuma and K. Ishida, "Damping Properties of Ductile Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys", *Mater. Trans.*, 46 (2005) 118-122.
- T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Shape Memory Effect in the Ferromagnetic Co-14at.% Al Alloy", *Scripta Mater.*, 52 (2005) 565-569.
- H. Shima, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Ishida and A. Sakuma, "Lattice Axial Ratio and large Uniaxial magnetocrystalline Anisotropy in $L1_0$ -type FePd Single Crystals Prepared under Compressive Stress", *Phys. Rev.*, B70, (2004) 2244081/1-7.
- H. Shima, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi and K. Ishida, "Large Magnetocrystalline Anisotropy Energy of $L1_0$ -type $Co_{100-x}Pt_x$ Bulk Single Crystal Prepared under Compressive Stress", *Appl. Phys. Letters*, 86 (2004) 112515-112517.
- H. Shima, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Ishida "Magnetic Anisotropy and Magnetostriction in $L1_0$ -type FePd Alloy", *J. Magnetism and Magnetic Mater.*, 272-276 (2004) 2173-2174.
- R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, R. Kainuma, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Ishida and A. Sakuma "Magnetic Properties and Band Structures of Half-metal-type Co_2CrGa Heusler Alloy ", *Appl. Phys. Lett.*, 85, (2004) 2011-2013.
- T. Omori, N. Kamiya, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Transformations in Ni-Ga-Fe Ferromagnetic Shape Memory Alloys", *Mater. Sci. Eng. A*, 378 (2004) 403-408.
- K. Kobayashi, R. Umetsu, R. Kainuma, K. Ishida, R. Oyamada, A. Fujita and K. Fukamichi "Phase Separation and Magnetic Properties of Half-metal-type $Co_2Cr_{1-x}Fe_xAl$ Alloys", *Appl. Phys. Lett.*, 85, (2004), 4684-4686.
- Y. Sutou, Y. Imano, N. Koeda, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, "Magnetic and Martensitic Transformations of $NiMnX$ ($X=In, Sn, Sb$) Ferromagnetic Shape Memory Alloys", *Appl. Phys. Lett.*, 85, (2004) 4358-4360.
- K. Oikawa, G. W. Qin, M. Sato, S. Okamoto, O. Kitakami, Y. Shimada, K. Fukamichi, K. Ishida and T. Koyama, "Direct Observation of Magnetically Induced Phase Separation in Co-W-Sputtered Thin Films", *Appl. Phys.*

Lett., 85 , (2004) 2559-2561.

- M. Jiang, J. Sato, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida " A Thermodynamic Assessment of the Co-Sn System", CALPHAD 28, (2004) 213-220.
- C. P. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, " Thermodynamic Database of Phase Diagrams in Cu-Fe Base Ternary System", J. Phase Equilib. & Diffusion., 25(2004) 320-328.
- X. J. Liu, C. P. Wang, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Experimental Investigation and Thermodynamic Calculation of the Phase Equilibria in the Cu-Sn and Cu-Sn-Mn Systems ", Metall. Mater. Trans. A, 35A (2004) 1641-165.
- K. Oikawa, N. Koeda, Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, " Martensitic Transformation and Magnetic Properties of Cu-Ga-Mn β Alloys", Mater. Trans., 45 (2004) 2780-2784.
- Y. Murakami, H.S. Park, J.H. Yoo, D. Shindo, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Electron Holography Studies on Magnetic Domain in Ferromagnetic Shape Memory Alloys", Metals and Materials International, 10 (2004) 207-211.
- C. P. Wang, X. J. Liu, Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, " Formation of Core-Type Macroscopic Morphologies in Cu-Fe Base Alloys with Liquid Miscibility Gap ", Metall. Mater. Trans. A, 35A (2004) 1243-1253.
- X. J. Liu, T. Yamaki, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, " Thermodynamic Calculations of Phase Equilibria, Surface Tension and Viscosity in the In-Ag-X (X=Bi, Sb) System ", Mater. Trans., 45 (2004) 637-645.
- Y. Takaku, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, " Interfacial Reaction and Morphology between Molten Sn Base Solders and Cu Substrate ", Mater. Trans., 45 (2004) 646-651.
- Z. Moser, W. Gasior, J. Pstrus, S. Ishihara, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, " Surface Tension and Density Measurements of Sn-Ag-Sb Liquid Alloys and Phase Diagram Calculations of the Sn-Ag-Sb Ternary System", Mater. Trans., 45, (2004) 652-660.
- Y. Himuro, Y. Tanaka, N. Kamiya, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, " Stability of ordered L12 Phase in Ni₃Fe-Ni₃X (X: Si and Al) Pseudobinary Alloy", Intermetallics, 12 (2004) 635-643.
- K. Ishikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Aoki and K. Ishida, " Phase Equilibria and Stability of Heusler-type Aluminides in the NiAl-Ni₂AlTi-Ni₂AlY (Y: V, Cr or Mn) Systems ", J. Alloys & Comp., 367 (2004) 2-9.
- N. Kamiya, T. Sasaki, R. Kainuma, I. Ohnuma and K. Ishida, "Phase Separation of BCC Phase in the Co-rich Portion of Co-Fe-Al System", Intermetallics, 12, (2004) 417-423.

- Y. Tanaka, T. Omori, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Ferromagnetic Co-Ni-Al Shape Memory Alloys with $\beta+\alpha$ Two-Phase Structure.", *Mater. Trans.*, 45 (2004) 427-430.
- 佐藤順, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-W系 α Co相中の磁気変態により誘起される2相分離の実験的検討と相並行の熱力学的計算", *日本金属学会誌*, 68 (2004) 992-1001.

<産業技術総合研究所>

- Yuuki Tanaka, Toshihiro Ohmori, Katsunari Oikawa, Ryosuke Kainuma and Kiyohito Ishida: Ferromagnetic Co-Ni-Al Shape Memory Alloys with $\alpha + \beta$ Two-Phase Structure: *Materials Transactions*, 45 (2004) 427-430.
- Katsunari Oikawa, Naoki Koeda, Yuji Sutou, Toshihiro Omori, Ryosuke Kainuma and Kiyohito Ishida: Martensitic Transformation and Magnetic Properties of Cu-Ga-Mn β Alloys: *Materials Transactions*, 45 (2004) 2780-2784.
- K. Oikawa and G. W. Qin, M. Sato, S. Okamoto, O. Kitakami, and Y. Shimada, K. Fukamichi and K. Ishida, T. Koyama: Direct observation of magnetically induced phase separation in Co-W sputtered thin films: *Applied Physics Letters*, 85 (2004) 2559-2561.
- 佐藤 順, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁: Co-W系 α Co相中の磁気変態により誘起される2相分離の実験的検討と相平衡の熱力学的計算: *日本金属学会誌*, 68 (2004) 992-1001
- Y. Sutou, Y. Imano, N. Koeda, T. Omori, R. Kainuma, and K. Ishida, K. Oikawa: Magnetic and martensitic transformations of NiMnX(X=In, Sn, Sb) ferromagnetic shape memory alloys: *APPLIED PHYSICS LETTERS*, 85 (2004) 4358-4360.

< (独) 物質・材料研究機構 >

国内誌 (国内英文誌を含む)

- T. Kunieda, Y. Murata, M. Morinaga, and T. Koyama: "Effect of Refractory Elements (X: Mo, W, Re) on the Microstructure Evolution of Fe-8Cr-0.1C-X Martensitic Steels during Tempering", *Mater. Trans.*, **45**, 392-395, (2004).
- 小山敏幸、小野寺秀博: "Phase-field 法に基づくFePt微粒子規則化に対するサイズ依存性の解析", *日本金属学会誌*, **68**, 1008-1012 (2004).
- T. Koyama and H. Onodera: "Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Based on the Phase-Field Method", *Trans. MRS-J*, **29**, 3775-3778 (2004).

国外誌

- T.Koyama: "Computer Simulation of Phase Decomposition in Magnetic Materials Based on the Phase-field Method", Defect and Diffusion Forum, **237-240**, 593-602, (2005).
- K.Oikawa, G.W. Qin, M. Sato, S. Okamoto, O. Kitakami, Y. Shimada, K. Fukamichi, K. Ishida, and T.Koyama: "Direct Observation of Magnetically Induced Phase Separation in Co-W Sputtered Thin Films", Applied Phys. Lett., **85**, 2559-2561, (2004).
- T.Koyama and H.Onodera: "Phase-Field Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Under External Magnetic Field", Metals and Materials International, **10**, 321-326 (2004).
- X.Y.Xiong, T. Ohkubo, T.Koyama, K. Ohashi, Y. Tawara, and K.Hono: "The microstructure of sintered $\text{Sm}(\text{Co}_{0.72}\text{Fe}_{0.20}\text{Cu}_{0.055}\text{Zr}_{0.025})_{7.5}$ permanent magnet studied by atom probe", Acta Mater., **52**, 737-748, (2004).
- Y.K.Takahashi, T.Koyama, M. Ohnuma, T. Ohkubo, and K.Hono: "Size dependence of ordering in FePt nanoparticles", J. App. Phys., **95**, 2690-2696, (2004).
- Kim SG, Kim WT, Suzuki T, Ode M, "Phase-field modeling of eutectic solidification", J. Crystal Growth, **261**, 135-158, (2004).
- M.Ode, S.G.KIM, W.T. KIM and T. SUZUKI, "Numerical Simulation of Peritectic Reaction in Fe-C Alloy Using a Multi-phase-field Model", ISIJ Int., 45, 147-149, (2005)
- M.Ode, H. Murakami, H. Onodera, "Self-propagating high-temperature synthesis of IrAl and its application to Coating process", Scripta mater., 52, 1057-1062.

<九州工業大学>

- K. Doi, H. Ohtani, M. Hasebe: *Thermodynamic study of the phase equilibria in the Sn-Ag-Bi-Cu quaternary system*, Mater. Trans., **45**(2004) No.2, pp.380-383
- H. Ohtani, S. Ono, K. Doi, M. Hasebe: *Thermodynamic study of phase equilibria in the Sn-Ag-Bi-Zn quaternary system*, Mater. Trans. **45**(2004), No.3, pp.614-624
- 大谷博司, 長谷部光弘: 第一原理計算を援用した状態図の熱力学的解析, ふえらむ, **9**(2004), No.4, pp 223-229
- H. Ohtani, Y. Chen, M. Hasebe: *Phase Separation of the B2 Structure Accompanied by an Ordering in Co-Al and Ni-Al Binary Systems*, Mater. Trans., **45**(2004), No.5, pp.1489-1498

- H. Ohtani, Y. Takeshita, M. Hasebe : *Effect of the Order-Disorder Transition of the bcc Structure on the Solubility of Be in the Fe-Be Binary System*, Mater. Trans., **45**(2004), No. 5, pp.1499-1506
- T. Tokunaga, K. Hashima, H. Ohtani, and M. Hasebe : *Thermodynamic Analysis of the Ni-Si-Ti System Using Thermochemical Properties Determined from Ab Initio Calculations*, Mater. Trans., **45**(2004), No. 5, pp.1507-1514
- 大谷博司, 柳龍治, 長谷部光弘: *Cu-Be 2元系状態図と準安定析出物について*, 日本学術振興会合金状態図第172委員会研究報告書, **4**(2004), No. 1, pp. 10-16
- H. Ohtani, M. Yamano, M. Hasebe: *Thermodynamic Analysis of the Fe-Al-C Ternary System by Incorporating ab initio Energetic Calculations into the CALPHAD approach*, ISIJ International, **44**(2004), No. 10, pp.1738-1747
- 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘: *CALPHAD法を援用したFe-Si-BおよびNi-Si-B 3元合金のアモルファス形成能の評価*, 日本学術振興会合金状態図第172委員会研究報告書, **4**(2004), No. 2, pp. 84-91
- H. Ohtani, M. Yamano, M. Hasebe: *Thermodynamic analysis of the Co-Al-C and Ni-Al-C systems by incorporating ab initio energetic calculations into the CALPHAD approach*, Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, **28**(2004), pp. 177-190
- 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘: *CALPHAD法を援用したNi-Si-B 3元合金のアモルファス形成能の評価*, 日本金属学会誌, **68**(2004), No. 12, pp.1002-1007
- 大道雅幸, 里昌英, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘: *鉄系クラッド材の界面における拡散挙動*, 日本金属学会誌, **68**(2004), No. 12, pp.1013-1019

(2) 特許出願

H16年度特許出願件数 : 0 件 (CREST研究期間累積件数 : 1 件)