

「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う(独)物質・材料研究機構、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

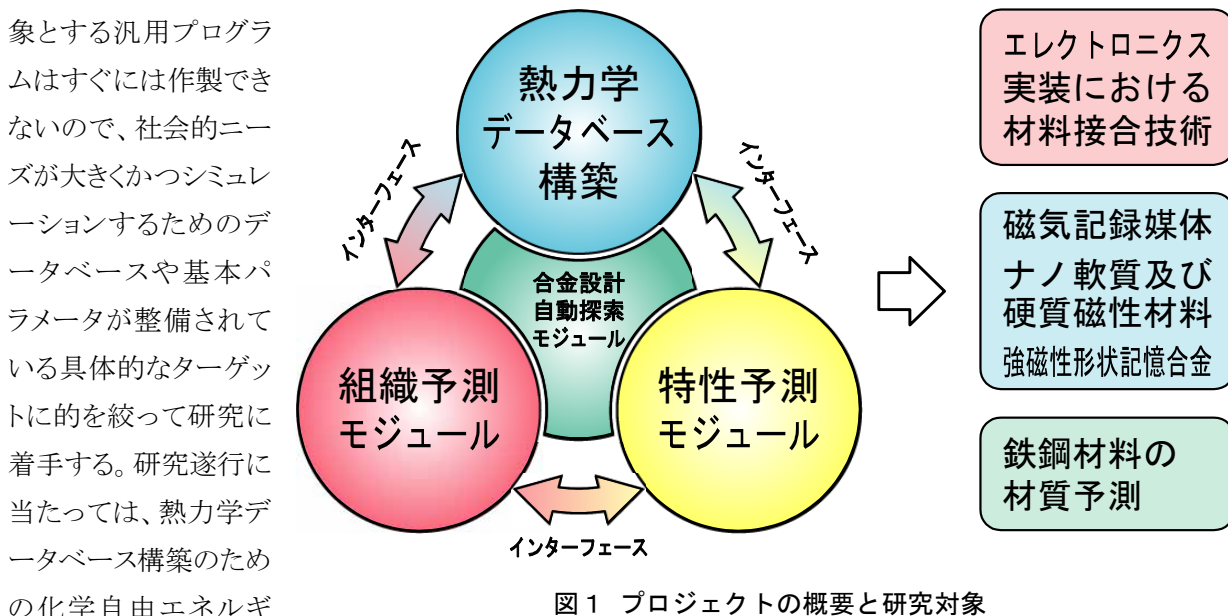


図1 プロジェクトの概要と研究対象

化学自由エネルギーと、組織予測を行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。

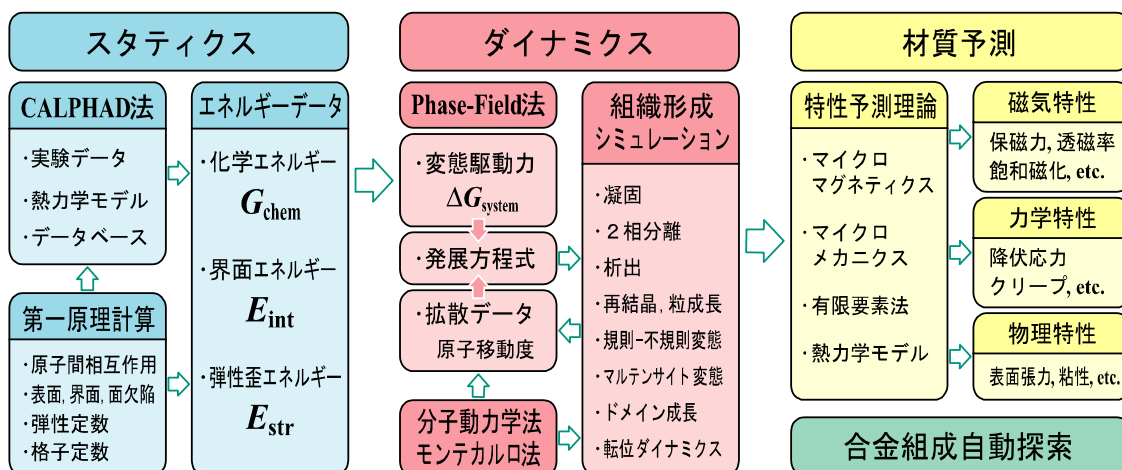


図2 シミュレーションの内容

(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) マイクロ溶剤材及び Cu 基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。そのためのいくつかの3元系の実験と解析を行った。また Cu 基合金につ

いては現在 Cu、Cr、Ni、Sn、Fe、Zn、Si、Ti の8元素のデータベースを構築しているがこれに Zr、B、P、Mgを加えた大規模のデータベースを作成する事を目標とする。本年度はBとP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

合金組成自動探索システムは、融点や凝固温度範囲等目的とする物性をインプットし、熱力学データベースを用いてそれに適合する合金組成をコンピュータで自動的に探索するシステムである。特に今年度、4元系以上では処理速度を速めなければならないことを踏まえて、等温断面図を活用する形式に改修した。具体的には平衡計算等温断面図と連成させ液相線を把握しながら固相線等を計算する。添加元素濃度を連続的に処理するだけでなく非連続的な処理で探索を行うことができる。

(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-Cr2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様に分配し、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。今年度は Co-Cr と同様に磁気特性が期待できる Co-W 薄膜について組織シミュレーションが出来るようになった。

(ii) 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、Ni-Mn-In 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。本年度は六方晶からオルソロビツク構造変相変態のシミュレーションを行った。

(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。本年度は昨年度に引き続き Fe-C 系における球状化過程のシミュレーション, 及び中炭素鍛造用鋼の相変態の統合計算予測を行った。

3. 研究実施体制

(1)「東北大学(石田)」グループ

①グループリーダー

石田 清仁(東北大学工学研究科 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

(2)「東北大学(安斎)」グループ

①グループリーダー

安斎 浩一(東北大学工学研究科 教授)

②研究項目

・Pb フリーはんだのシミュレーション

(3)「東北大学(小池)」グループ

①グループリーダー

小池 淳一(東北大学工学研究科 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

(4)「東北大学(及川)」グループ

①グループリーダー

及川 勝成(東北大学助 教授)

②研究項目

・Fe-S 基計算状態図のデータベース開発
・強磁性形状記憶合金の開発
・Co 基計算状態図データベースと磁気記録媒体の開発

(5)「(独)物質・材料研究機構」グループ

①グループリーダー

小野寺 秀博((独)物質・材料研究機構材料信頼性センター センター長)

②研究項目

(1) Phase-field 法による組織形成過程のモデル化及び組織・特性予測

- ・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
- ・磁気記録媒体、ナノ軟磁性材料及び強磁性形状記憶合金のシミュレーション
- ・鉄鋼材料の材質予測シミュレーション
- ・統合化システムプロトタイプ構築

(2) 合金組成自動探索システムの開発

(6)「九州工業大学」グループ

①グループリーダー

長谷部光弘(九州工業大学工学部 教授)

②研究項目

- ・マイクロアロイング鋼およびニッケル基合金の熱力学パラメータの評価
- ・燐化物およびホウ化物の熱力学量の第一原理計算
- ・CALPHAD 法を用いたアモルファス形成能の評価

(7)「㈱豊田中央研究所」グループ

①グループリーダー

中西 広吉(㈱豊田中央研究所・材料分野先進金属研究室 室長)

②研究項目

- ・鉄鋼の相変態シミュレーション

(8)「JFE スチール(株)」グループ

①グループリーダー

長滝 康伸(JFE スチール(株)・スチール研究所 グループリーダー)

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

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

<東北大学グループ>

- T. Sakon, S. Yamazaki, Y. Kodama, M. Motokawa, T. Kanomata, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, “Magnetic Field-Induced Strain of Ni-Co-Mn-In Alloy in Pulsed Magnetic Field”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 46, No. 3A (2007) pp995-998.
- R. Ducher, R. Kainuma and K. Ishida, “Phase equilibria in the Ni-rich portion of the Ni-Ga binary system”, Intermetallics 15 (2007) pp 148-153.

- K. Kobayashi, K. Ishikawa, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, K. Aoki and K. Ishida, "Phase Stability of B2 and L2₁ ordered phases in Co₂YGa (Y=Ti, V, Cr, Mn, Fe) alloys", *J. of Mag. Materials* 310 (2007) pp 1794-1795.
- S. Farjami, T. Koyama, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase-field simulation of dragging of liquid Bi particles during the thermally activated migration of grain boundaries in the Al-Bi system", *Scripta Materialia* 56 (2007) pp 433-436.
- Y.-W. Cui, T. Koyama, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Simulation of hexagonal-orthorhombic phase transformation in polycrystals", *Acta. Materialia*, 55 (2007) pp223-241.
- Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe and K. Ishida, "Development of Bi-Base High-Temperature Pb-Free Solders with Second-Phase Dispersion: Thermodynamic Calculation, Microstructure, and Interfacial Reaction", *J. of Electronic Materials*, Vol. 35 No. 11 (2006) pp1926-1932
- Y. Murakami, D. Shindo, K. Kobayashi, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "TEM studies of crystallographic and magnetic microstructures in Ni-based ferromagnetic shape memory alloys", *Material Science and Engineering A* 438-440 (2006) pp 1050-1053.
- Y. Tanaka, K. Oikawa, Y. Sutou, T. Omori, R. Kinuma and K. Ishida, "Martensitic transition and superelasticity of Co-Ni-Al ferromagnetic shape memory alloys with $\beta + \gamma$ two-phase structure", *Materials Science and Engineering, A* 438-440 (2006) pp1054-1060.
- T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Shape memory and magnetic properties of Co-Al ferromagnetic shape memory alloys", *Materials Science and Engineering, A* 438-440 (2006) pp1045-1049.
- Y. Tanaka, Y. Himuro, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic transformation and shape memory effect in ausaged Fe-Ni-Si-Co alloys", *Materials Science and Engineering, A* 438-440 (2006) pp1030-1035.
- Y. Imano, T. Omori, K. Oikawa, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic and magnetic transformations of Ni-Ga-Fe-Co ferromagnetic shape memory alloys", *Materials Science and Engineering, A* 438-440 (2006) pp970-973.
- H. Chinen, J. Sato, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "New ternary compound Co₃(Ge, W) with L1₂ structure", *Scripta Materialia* 56 (2006) pp141-143.
- R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, H. Morito, Y. Sutou, K. Oikawa, A. Fujita and K. Ishida, "Metamagnetic shape memory effect in a Heusler-type Ni₄₃Co₇Mn₃₉Sn₁₁ polycrystalline alloy", *Applied Physics Letters* 88 (2006) pp 192513-1-3.
- Y. Sutou, K. Yamauchi, M. Suzuki, A. Furukawa, T. Omori, T. Takagi, R. Kainuma, M. Nishida and K. Ishida, "High maneuverability guidewire with functionally graded properties using new superelastic alloys", *Minimally Invasive Therapy*, 15 (2006) pp 204-208.

- T. Takagi, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Yamauchi and K. Ishida, "Effect of Pre-strain on martensitic transformation in a $Ti_{47.6}Ni_{46.4}Nb_{6.0}$ superelastic alloy and its application to medical stents", *J. Biomedical Materials Research part B*, 76 (2006) pp 179-183.
- R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, Y. Sutou, H. Morito, S. Okamoto, O. Kitakami, K. Oikawa, A. Fujita, T. Kanomata and K. Ishida "Magnetic-field-induced shape recovery by reverse phase transformation", *Nature*, 439 (2006) pp957-960.
- K. Ando, T. Omori, J. Sato, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Effect of Alloying Elements on fcc/hcp Martensitic Transformation and Shape Memory Properties in Co-Al Alloys", *Material transactions*, 47 (2006) pp2381-2386.
- T. Omori, W. Ito, K. Ando, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "FCC/HCP Martensitic Transformation and High-Temperature Shape Memory Properties in Co-Si Alloys", *Material Transactions*, 47 (2006) pp2377-2380.
- K. Oikawa, Y. Tanaka, Y. Sutou, T. Omori, F. Luo, R. Kainuma and K. Ishida, "Effects of Aging and Co Addition on Martensitic and Magnetic Transitions in Ni-Al-Fe β -based Shape Memory Alloys", *ISIJ International*, 46 (2006) pp1287-1291.
- Y. Yamada, Y. Takaku, Y. Yagi, Y. Nishibe, I. Ohnuma, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Pb-free High Temperature Solders for Power Device Packaging", *Microelectronics Reliability* 46 (2006) pp1932-1937.
- Y. Murakami, T. Yano, D. Shindo, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida, "Magnetic domain structure in a metamagnetic shape memory alloy $Ni_{45}Co_5Mn_{36.7}In_{13.3}$ ", *Scripta Materialia* 55 (2006) pp683-686.
- Y. W. Cui, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Study of Diffusion Mobility of Al-Zn Solid Solution", *J. Phase Equilib. & Diffusion*, 27 (2006) No.4, pp333-342.
- I. Ohnuma, K. Ishida, Z. Mozer, W. Gąsior, K. Bukat, J. Pstrus, R. Kisiel and J. Sitek, "Pb-Free Solders : Part II , Application of ADAMIS Database in Modeling of Sn-Ag-Cu Alloys with Bi Additions", *J. Phase Equilib. And diffusion*, 27 (2006) pp245-254.
- J. Sato, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida "Cobalt-Base High Temperature Alloys", *Science*, 312 (2006) pp90-91.
- K. Oikawa, W. Ito, Y. Imano, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida "Effect of magnetic field on martensitic transition on $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$ Heusler alloy", *Appl. Phys. Letters*, 88 (2006) pp132507-1-132507-3.
- K. Koyama, K. Watanabe, T. Kanomata, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida "Observation of field-induced reverse transformation in ferromagnetic shape memory alloy $Ni_{50}Mn_{36}Sn_{14}$ ", *Appl. Phys. Letters*, 88 (2006) pp132505 -1-132505-3.
- P. J. Brown, A. P. Gandy, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, K-U. Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck "The magnetic and structural properties of the magnetic shape

memory compound $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.44}\text{Sn}_{0.56}$ ", *J. Phys. Condens. Matter*, 18 (2006) pp2249-2259.

- I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida "Carbide Dispersion Carburizing (CDC) of Fe-Mo-V Based High-speed Steels", *ISIJ International*, 46 (2006) pp310-315.
- Z. Moser, W. Gąsior, J. Pstruś, I. Ohnuma and K. Ishida, " Influence of Sb additions on Surface tension and density of Sn-Sb, Sn-Ag-Sb and Sn-Ag-Cu-Sb alloys: Experiment vs. modeling", *Int. J. Mat. Res. (Metallkd.)*, 97 (2006), pp365-370.
- Z. Moser, W. Gąsior, K. Bukat, J. Pstruś, R. Kisiel, J. Sitek, K. Ishida and I. Ohuma, "Pb-Free Solders: Part 1. Wettability Testing of Sn-Ag-Cu Alloys with Bi Additions", *J. Phase Equilib.& Diffusion.*, 27 (2006), pp133-139.
- R. Umino, X. J. Liu, Y. Sutou, C. P. Wang, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Experimental Determination and Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Fe-Mn-Al System", *J. Phase Equilib.& Diffusion.*, 27 (2006), pp54-62.
- K. Kobayashi, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Separation and Stability of L_{21} -Type Phase in $\text{Co}_2(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)(\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y)$ Alloys", *Mater. Trans.*, 47 (2006), No.1, pp20-24.
- K. Oikawa, T. Ota, Y. Imano, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and Phase Transformation of Co-Ni-Ga Ferromagnetic Shape Memory Alloy System", *J. Phase Equilib.& Diffusion.*, 27 (2006), pp75-82.

<九州工業大学グループ>

- T. Tokunaga, S. Matsumoto, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Nb-Ni-Ti-Zr Quaternary System", *Mater. Trans.*, 48(2007), No.2, pp 89-96.
- T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Assessment of the Al-Cr System by Combining the First Principles and CALPHAD Methods", *Materials Science Forum*, 539-543(2007) , pp 2407-2412
- H. Ohtani, N. Hanaya and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of Steels by Incorporating First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", *Materials Science Forum*, 539-543(2007) , pp 2413-2418.
- T. Tokunaga, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of the Zr-Be system using thermochemical properties based on ab initio calculations", *Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 30 (2006), No.2, pp201-208.
- H. Ohtani, N. Hanaya, M. Hasebe, S. Teraoka, and M. Abe, "Thermodynamic analysis of the Fe-Ti-P ternary system by incorporating first-principles calculations into the CALPHAD approach", *Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 30 (2006), No.2, pp147-158.
- 中島一喜, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Be-Mo 2 元系状態図の熱力学的解析",

日本金属学会誌, 71(2007) No.2, pp 187-189.

- 徳永辰也, 松本智史, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Zr 系における相平衡の熱力学的手解析", 日本金属学会誌, 70 (2006), No.9, pp741-749.
- 大谷博司, 長谷部光弘, "析出物の溶解度の熱力学", ふえらむ, 11 (2006), 457-463.
- 長谷部光弘, "異相界面での各種平衡モードを考慮した相変態の熱力学と状態図", ふえらむ, 11 (2006), pp349-353.

< (独) 物質・材料研究機構グループ >

- T. Abe, M. Shimono, M. Ode and H. Onodera, "Estimation of the glass forming ability of the Ni-Zr and the Cu-Zr alloys", Journal of Alloys and Compounds, in press.
- Abe T, Ode M, Murakami H, Kocer C, Oh C-S, Onodera H, "The thermodynamic assessment of the Ir-based alloy systems", Materials Science Forum Vols. 539-543 (2007) pp. 2389-2394.
- Koyama T, Onodera H, "Phase-field Modeling of the Microstructure Evolutions in Fe-Cu Base Alloys", Materials Science Forum Vols. 539-543 (2007) pp. 2383-2388.
- Suwa Y, Saito Y, Onodera H, "Computer Simulation of Grain growth in Three Dimensions by the Phase Field Model with Anisotropic Grain Boundary Mobilities", Materials Science Forum Vols. 539-543 (2007) pp. 2437-2442.
- T. Koyama, K. Hashimoto and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of Phase Transformation in Fe-Cu-Mn-Ni Quaternary Alloy", Materials Transactions, 47 (2006), pp2765-2772.
- T. Koyama and H. Onodera, "Modeling of Microstructure Changes in Fe-Cr-Co Magnetic Alloy Using the Phase-field Method", J Phase Equilibria and Diffusion, Vol.27 (2006), pp22,
- T. Abe, Masato Shimono, Machiko Ode, Hidehiro Onodera: "Thermodynamic modeling of the undercooled liquid in the Cu-Zr system", Acta Mater., Vol.54 (2006), No.2, pp909-915,
- T. Abe, Bo Sundman, Hidehiro Onodera, "Thermodynamic assessment of the Cu-Pt system", J Phase Equilibria and Diffusion, Vol.27 (2006), No.1, pp5-13.
- T. Abe, M. Shimono, K. Hashimoto, K. Hono and H. Onodera, "Phase separation and glass-forming abilities of ternary alloys", Scripta Mater., Vol.55 (2006), 5, pp421-424,
- Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Phase field simulation of grain growth in three dimensional system containing finely dispersed second-phase particles", Scripta Mater., Vol. 55 (2006), 4, pp407-410,
- T. Koyama and H. Onodera, "Phase-field modeling of structural elongation and alignment of (α + γ) microstructure in Fe-0.4C alloy during thermomagnetic treatment", ISIJ Int., Vol.46 (2006), No.9, pp1277-1282,
- M. Ode, M. Ueshima, T. Abe, H. Murakami and H. Onodera, "Numerical prediction of fraction of eutectic phase in Sn-Ag-Cu soldering using the phase-field method", J. Electron. Mater. To be

appeared Vol.36 (2006), No.11, pp. 1969-1974.

- 小山敏幸, "Phase-field 法の最近の発展とメソスコピック組織研究の実効的指針", 分子シミュレーション研究会会誌, アンサンブル”, 8 (2006), No.4, pp20-25.
- 橋本清, "市販状態図計算ソフトウェア Pandat の紹介と研究者個人によるそのデータベースの操作方法", ふえらむ, No11 (2006), pp715-721.
- 小野寺秀博, "状態図 (相変態編) - 自信を持って使うための熱力学基礎序文-", ふえらむ, Vol.11 (2006), No5, pp291-293.
- 阿部太一, "一状態図 (相変態編) - 自信を持って使うための熱力学基礎- 6, 状態図計算プログラムの解説", ふえらむ, Vol.11 (2006), No.8, pp520-527.
- 大出真知子, 小野寺秀博, "鉛フリーはんだ凝固組織の計算機シミュレーション", まてりあ, (45 巻, 5 号, pp353, 2006)
- 小山敏幸, "状態図 (相変態編) - 自信を持って使うための熱力学基礎- 6, 状態図から組織形成シミュレーションへ", ふえらむ, Vol.11 (2006), No10, pp647-657,
- 小山敏幸, 第 7 章, ナノ金属設計 第 3 節, Phase-field 法, "ナノマテリアル工学大系, 第 2 巻, ナノ金属", フジテクノシステム, (2006) pp458-464,
- 小山敏幸(分担執筆), "ナノシミュレーション技術ハンドブック", 共立出版, (2006) pp84-89.

< 豊田中央研究所グループ >

- K. Tanaka, H. Kawaura, N. Matsumoto and K. Nishino, "Alloy Design of a cost-effective and castable heat-resistant iron alloys", Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 30 (2006), No.4, 415-420.
- K. Tanaka, M. Hara, Y. Yogo, K. Nakanishi and C. Capdevila, "", Materials Science Forum, Vol. 539-543 (2007), pp2443-2448

(2) 特許出願

平成 18 年度特許出願: 4 件 (CREST 研究期間累積件数: 24 件)