

## 研究課題構想・概要

○研究課題名 「 計算機支援による耐熱コーティング材の設計 」  
○提案者名 「 大出真知子 」  
○所属機関名 「 独立行政法人 物質・材料研究機構 」

### 研究の目標・概要

#### 1. 目標

一年目：NiAl 2元系合金と Ir,Re,Ta 間の拡散データの取得。フェーズフィールド法の金属間化合物モデルへの拡張と、拡散・組織変化の再現。  
二年目：IrAl 基コーティング材を適用した実用多元系超合金の組織変化予測。  
三年目：計算機援用によるコーティング用合金の最適化設計。

#### 2. 内容

超合金基材とコーティング材料界面近傍の組織変化予測手法の確立。得られた組織変化（有害相の析出等）から最適合金組成の選択。計算手法はフェーズフィールド法を採用。

#### 3. 新規性・独創性

拡散による基材とコーティング材界面近傍の組織変化を予測し、合金設計に援用するシステムは他に類がない。

#### 4. 必要性

耐熱構造材の耐用温度向上のためにはコーティング合金の最適化が不可欠。多元系基材との相互作用を実験的調査は非効率的であり、計算機援用による効率化が必要。

#### 5. 他の競争的資金等には馴染まない理由

提案者のような若手任期付研究員が採用後、1週間以内に応募可能で審査が迅速な競争的資金は他に類がない。

### 諸外国の現状等

#### 1. 現状

欧米諸国はエネルギー対策の中でコーティング技術を重要問題ととらえ、ある米国メーカーでは50人体制でコーティングシステムの開発を行っている。

#### 2. 我が国の水準

研究チームの単位は数人程度であり、現在の反復実験とデータの蓄積による合金開発を続けるならば、欧米諸国に対して研究の優位性を保つことは難しい。その対策として計算機による合金設計援用が不可欠である。

### 研究の進展及び成果がもたらす利点

#### 1. 世界の水準との関係

基材／コーティング材の相互拡散による組織変化を予測して合金設計を行うシミュレーション手法は他に類がない。超合金・コーティング材料への Ir 使用は近年開始されたばかりであり、拡散データは報告がなく今後の研究の標準データに位置づけられる。

#### 2. 役及効果

自動車エンジンやロケット材料等の耐熱構造材表面処理プロセスの開発に広く応用が可能である。また、計算機シミュレーションは既存プロセスで得ることができないコーティングシステムを評価することが可能なため、プロセス技術改良へのフィードバックも期待できる。

# 計算機支援による耐熱コーティング材の設計

(研究機関名) 独立行政法人 物質・材料研究機構  
(研究者氏名) 大出真知子

## 1. 研究の意義、目的、必要性

エネルギー問題の観点から熱機関部品に使用されるNi基超合金の耐用温度の更なる上昇が望まれている。エネルギー問題を重要課題と位置付ける欧米諸国は本分野に重点的に研究資源を投入しており、その中でも耐酸化や断熱効果を狙ったコーティングシステムの新規材料開発は中核を成している。本研究は、今後の開発競争に対して計算機支援は不可欠であるという認識のもとフェーズフィールドシミュレーションによるコーティング用合金の最適化システムの開発を目標とする。

## 2. 研究概要

コーティング合金の評価を合金元素の内部拡散による組織変化を基準として行う。組織変化予測はフェーズフィールド法を用いる。金属間化合物内の拡散挙動とそれに伴う組織変化を予測するため、実験（後述）との比較により化合物の自由エネルギー曲線の関数形最適化を行う。得られた関数を用い、コーティング材／基材間の相互作用予測手法を確立する。上記の最適化には拡散係数と自由エネルギー関数が必要である。自由エネルギー関数は金属間化合物の関数形を除き、Thermocalcのデータとして入手する。拡散データとして超合金基材とコーティング材の単結晶拡散対を真空加熱処理し濃度分布変化を測定する。また、熱処理後の組織変化を電子顕微鏡にて観察する。

## 3. 研究目標

フェーズフィールドシミュレーションによる超耐熱合金コーティング用材の最適化システム開発と新規材料の提案を目標とする。まずフェーズフィールド法を金属間化合物内拡散可能にする。次に基材2元合金＋コーティング純金属の3元系において手法の基礎を確立し、第4、5元素や応力場の影響を評価可能なモデルに拡張する。その後は予測システムを新規コーティング材料開発に援用していく。

