

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 6 月 7 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2016～2020

課題番号：16H02387

研究課題名（和文）Convex hullを用いた理論状態図の計算アルゴリズムに関する研究

研究課題名（英文）Development of calculation algorithm for theoretical phase diagrams using Convex hull method

研究代表者

大谷 博司 (Ohtani, Hiroshi)

東北大学・多元物質科学研究所・教授

研究者番号：70176923

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 35,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではConvex hullを用いた第一原理計算ベースの基底状態解析により、目的の相が他の相に対して有する相対的安定性を計算する手法と準安定性を克服する方法論の開拓に取り組み、電子論計算状態図の有効性と課題について検討した。理論状態図と実験状態図の比較から、両者にはわずかに異なる平衡が見られたが、自由エネルギーを数kJ/mol前後補正することで相境界が再現されたことから、この手法が状態図作成においてきわめて有用であることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究によって、各準安定構造のエネルギー準位と基底状態の自由エネルギー差を定量的に評価することが可能になった。この自由エネルギー差は、目的の新しい準安定物質の作製において熱力学的駆動力となることから、これを計算で求めることができるようになったことは、学問的にきわめて重要であると認識している。実験的なプロセスによってこのような準安定相を作製するためには、さらに活性化エネルギーを評価する必要があるが、Nudged Elastic Band法がこの活性化エネルギーを予測する上で有効な手法であることが確認されたことは今後の準安定構造の合成における重要な第一歩であると考えられる。

研究成果の概要（英文）：In this study, by first-principles calculation-based ground state analysis using Convex hull, the authors challenged to develop a technique to calculate the relative stability in which the objective phase has for other phases and a methodology to overcome the metastability, and examined the effectiveness and problem of electronic calculation phase diagram. Comparing the theoretical phase diagrams with the experimental ones, a slightly different equilibrium was found between them, but the phase boundary was reproduced by correcting the free energy back and forth for several kJ/mol, which indicates that this technique is very useful in the phase diagram calculation.

研究分野：金属組織学

キーワード：状態図 相平衡 電子論計算

1. 研究開始当初の背景

近年急速に発展している機械学習や第一原理計算に基づく網羅的な合金探索法は、新物質の発見に有効な手法である。実際これらの手法を用いて特性の優れた多くの材料の候補が発見されている。しかし探索された物質のほとんどは熱力学的に準安定構造であり、その熱力学的準安定性に合成を阻まれて、実用化できないことも認識され始めている。新たな相の出現を理論的に予測するためには、可能性のある全ての相の自由エネルギーとの熱力学的安定性を比較する必要があるが、単純な第一原理的合金探索ではこのような高度な判別は不可能である。一方、本来は目的の相が熱力学的に安定であるか否かは合金状態図が確立されていれば判断できるが、実験的な困難さにより多元系状態図はほとんど明らかになっていない。これは計算機による材料探索法が陥りがちなボトルネックの一つであることが本研究の背景となっていた。

2. 研究の目的

このような状況を踏まえて、本研究では Convex hull を用いた第一原理計算ベースの基底状態解析により、目的の相が他の相に対して有する相対的安定性を計算する手法と準安定性を克服する方法論の開拓に取り組むことを研究の目的とした。

3. 研究の方法

本研究の手法は次のようなスキームにまとめることができる。

- (1) 基底構造探索: ある系の状態図を作成するためには、相領域を構成する規則構造の同定が最も重要である。しかしながら、第一原理計算では物質の組成が決まっただけでは、それがたとえ単純な組成であっても、その安定な規則構造を予測することが困難である。近年、この問題に対して遺伝的アルゴリズム(GA)を用いることで、第一原理計算からの最安定構造の予測を行う計算手法が適用されている¹⁾⁻³⁾。遺伝的アルゴリズムはダーウィンの進化論を模倣し、自然淘汰、遺伝、突然変異などを採用した計算手法である。具体的な計算は、ランダムに作成した複数の規則構造のエネルギー計算を行い、その中でエネルギーの低いものを優先的に選択する。それらの構造の局所原子配置などの構成要素を遺伝子として見立て、それらを交配・突然変異させた次世代の構造群を作成する。新たな世代のエネルギー計算を行い、エネルギーの低いものを再選択する。この一連の手続きを繰り返し実行し、低エネルギー構造群を更新していくことで最安定構造を探索する。
- (2) 有限温度における熱力学物性値の計算: (1)によって得られた安定構造、準安定構造に対して第一原理計算により基底状態における生成エネルギーを計算する。第一原理計算によって評価した熱力学的性質は絶対零度における値であるため、有限温度の相平衡を計算するためには自由エネルギーを評価する必要がある。有限温度で大きな寄与を持つ成分は、格子振動によるものと固溶による原子サイトのランダムネスにより生じるものの二種類に大別される。前者については、第一原理計算を用いてフォノンの状態密度を計算し、さらに体積膨張の影響を取り入れることで、温度による生成エネルギーの変化を考慮する。後者については、多数の規則構造について計算された凝集エネルギーをクラスターで展開し、クラスター変分法で有限温度の固溶体の自由エネルギーを決定する。この手法を CE-CVM 法と呼ぶ。
- (3) 液相の自由エネルギーの計算: 第一原理分子動力学法によって液相の自由エネルギーを計算する。これまでこの方法で原子振動を調和振動により記述しようとする、エントロピーの積分が発散する問題があった。最近この問題に対して、液体状態が気体成分と固体成分から構成されると近似して発散を抑える two-phase model⁴⁾が提案され、ある程度の成功を収めている。そこで本研究では、原子振動の状態密度分布から気体成分と固体成分に分離した振動エントロピーを計算し、磁性、電子系のエントロピーも考慮しながら合金のエントロピー項を評価した。一方エンタルピーは全エネルギーのステップ依存性を解析して得られたエネルギー分布から計算した。第一原理分子動力学法によって計算した合金液相の自由エネルギーは、CALPHAD 法によってフィッティングされた結果とよく一致しており、さらに熱量分析などの実験的手段で決定された熱力学量ともよく対応していることが確認された。
- (4) 以上の方法で計算された合金系各相の自由エネルギーから有限温度の状態図を構成する。例えば平衡状態図は、平衡する可能性のある様々な相から Convex hull を構成することで計算できる。Convex hull とは凸包のことで、任意の集合を含む全ての凸集合の交わりを表す。たとえば二元系合金のエネルギー-組成図上では、様々な組成でエネルギーの最も低い最安定構造の点を結んだものがこれに該当する。二元系では一定温度、一定圧力下での自由度は 2 なので、二点を結んだ直線の集合になる。様々な温度においてこの Convex hull が計算できれば、それを組成平面上に投影することによって平衡状態図を描くことができることが基本原理である。三元系では同じ理屈で自由度は 3 なので、三点を結んだ平面の集合となる。四元系以上の多元系でも同様にこの手法の適用が可能である。

4. 研究成果

本研究手法によって得られた計算結果の妥当性を俯瞰するために、Fe-Mo-B 三元系の理論状態図を構成した例を示すことにする。さらに実際の実験状態図との比較を行いながら、この手法の問題点、今後の課題を検討した結果を示す。

(1) Fe-Mo-B 三元系の基底状態図の計算

Fe-Mo-B 三元系の基底探索の結果を図 1 に示した。図中の黒丸は本研究で得られた構造であり、四角印は実験的に確認されている化合物である。また実線は、GA によって探索された安定化合物から構成される二相の相境界であり、これらから構成される三角形の領域は、この三元系の基底状態では不変系反応である。

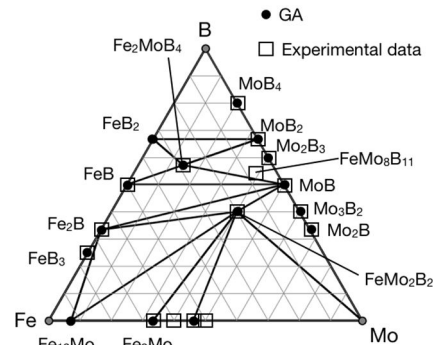


図 1 GA による基底状態探索の結果

(2) 準安定構造を含めた基底構造が実験結果と一致した化合物

はじめに FeB と MoB では GA ではどちらも $I4_1/amd$ が基底構造であるが、これらよりわずかに準安定となる化合物は実験による構造と一致する。これらの準安定構造の convex-hull からのエネルギー差は、どちらも 1 kJ/mol 前後であり、有限温度において構造相変態が起こる可能性がある。

Mo_2B , Mo_3B_2 , $Mo_2B(Mo_2B_4)$, MoB_4 , Fe_3B (1) については、基底構造ではないものの、それらよりもわずかにエネルギーの高い構造の中に実験的知見と一致する構造が確認された。 Mo_2B_3 (MoB_{2-x}) の空間群は実験的知見と異なっている。しかし、 $Imm2$ は $P6/mmm$ における B と空孔が 3:1 の比で規則化した構造に対応する。また X 線回折では、原子番号の小さい B の回折強度が弱いため、B の原子位置は十分に捕らえられない可能性がある。そこで、 $Imm2$ の構造中の B 原子を排除して空間群を判定すると、 $P6/mmm$ となることがわかった。さらに MoB_2 の組成を有する $P6/mmm$ の完全規則構造では、convex-hull からのエネルギー差が +14.3 kJ/mol であるのに対し、 $Imm2$ のそれは +1.5 kJ/mol であった。これらの考察から、本研究では Mo_2B_3 (MoB_{2-x}) の構造は $Imm2$ であると結論づけた。 Mo_2B , Mo_3B_2 , $Mo_2B(Mo_2B_4)$, $Mo_2B_3(MoB_{2-x})$, MoB_4 , Fe_3B (1) の六種類の化合物はいずれも convex-hull からのエネルギー差が 3 kJ/mol 以下であり、有限温度の平衡相として出現する可能性がある。

(3) 基底構造が実験結果と一致しなかった化合物

実験的に報告されている Fe_3Mo_2 (R), $FeMo$ (2), $FeMo_8B_{11}$ (3) については、GA によって探索された構造群の中に対応する構造が存在しなかった。この中で R は 159 原子⁵⁾、 2 は 30 原子⁶⁾ から構成される大きな単位胞の不規則構造である。本研究では単位胞の全原子数を 32 個に制限して構造探索を行ったために、R が探索されなかったと考えられる。また 2 も単位胞が 30 個の原子によって構成される複雑な構造であるため、GA でこの構造を探索するためには、世代数をさらに大きくする必要があると考えられる。一方、 $FeMo_8B_{11}$ (3) の結晶構造は不明で、 MoB (Rm) 型の固溶体であるという可能性もある。GA により得られた構造は Rm と見なすこともできるが、文献⁷⁾における第一原理を用いた熱力学解析では、 Rm 構造の $(Mo, Fe)B$ 型固溶体は熱力学的に不安定であることが確認されている。以上の理由から、本研究では Fe_3Mo_2 (R), $FeMo$ (2), $FeMo_8B_{11}$ (3) は自由エネルギー評価の対象から除外した。

(4) 実験によって確認されていない化合物

FeB_2 , $Fe_{13}Mo$ は、対応する規則構造が実験によって確認されていない基底構造である。 FeB_2 は、第一原理計算による Fe-B 二元系の基底探索によってその構造が安定であることが報告されており⁸⁾、本研究結果はこれと整合する。一方、 $Fe_{13}Mo$ は BCC-Fe の規則構造中の Fe 原子を Mo で置換した構造に対応する。そこでこの構造は BCC 固溶体に含まれるものとして取り扱った。

(5) 有限温度における Fe-Mo-B 三元系状態図の計算結果と実験状態図との比較

有限温度の相平衡を検討するために、GA により得られた規則構造群に対して準調和近似計算による自由エネルギー計算を行った。また固溶体に対しては、CE-CVM 法により一次固溶体の自由エネルギーを評価し、有限温度における Fe-Mo-B 三元系の相平衡を計算した。計算結果の一例として、実験により相平衡が調べられている $T = 1323$ K における理論状態図を図 2 に示した。この図には、比較のために、著者らが CALPHAD 法を用いて解析した計算状態図 (b) を実験値とともに示した。理論状態図 (a) は熱力学的解析による計算状態図と実験的知見をよく再現することから、本研究で提案する電子論ベースの新しい状態図計算手法の有効性が確認できる。しかし一部の相平衡には実験的知見との相違が見られるので、この点について考察していきたい。

図 2 において太字で記したのは、理論状態図と計算状態図の間で、結晶構造や存在領域に違いがあった化合物を示している。これをまとめると次のようになる。

Fe-B 二元系では、実験的に確認されていない FeB_2 が出現する。

Mo-B 二元系では、 MoB_4 の生成が実験的に確認されている。しかしこの構造は理論状態図には出現しない。また MoB の構造が異なっている。

Fe-Mo 二元系では, Fe_2Mo は実験温度範囲では生成しないが, 理論状態図では出現する. Fe-Mo-B 三元系では, $\text{FeMo}_8\text{B}_{11}$ (3) が実験的に確認されているが, 理論状態図では出現しないが, (3) に示した根拠によりここでは議論の対象としない. 本計算では, 化合物は全て化学量論化合物として扱い, 原子同士の固溶を考慮しなかった. 従ってこの点における実験結果との違いが認められるが, ここでは議論の対象としない.

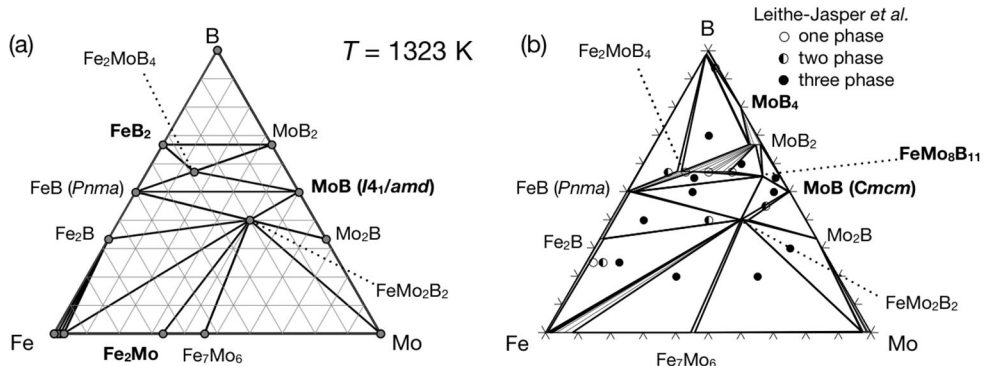


図 2 $T = 1323 \text{ K}$ における Fe-Mo-B 三元系の (a) 理論状態図と (b) 熱力学解析による計算状態図

から に関して, FeB_2 , MoB_4 , $\text{MoB} (I4_1/amd)$, Fe_2Mo の自由エネルギーをどの程度変えることで現実の相平衡を再現できるかについての検討を行った. 具体的には, これらの四種類の構造の自由エネルギーを 0.1 kJ/mol 間隔で変化させて相平衡を計算した. 図 3 はこの操作によって再現された 1323 K における理論状態図である. FeB_2 は $+2.4 \text{ kJ/mol}$, Fe_2Mo は $+0.8 \text{ kJ/mol}$, MoB は $+0.8 \text{ kJ/mol}$, MoB_4 は -0.9 kJ/mol だけ変化させることによって実験状態図が概ね再現される. なおこれらの化合物のエネルギー変化に伴って, 違いの見られなかった Mo_2B も $+0.6 \text{ kJ/mol}$ 変化させる必要が生じた. この検討より, 実験状態図と理論状態図の間の自由エネルギー差は数 kJ/mol 以内であり, 本研究から得られた自由エネルギーは現実の物性値に非常に近いことが明らかになった.

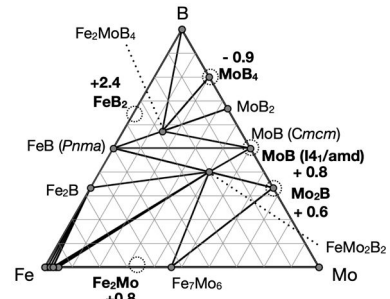


図 3 1323K における FeB_2 , MoB_4 , $\text{MoB} (I4_1/amd)$, Fe_2Mo 構造のエネルギーを修正した理論状態図. 図中の数値は各構造に与えたエネルギーの変化量 (単位は kJ/mol).

(6) エネルギーの乖離の原因とその対処方法の検討

これらのわずかなエネルギーの乖離の原因とその解決方法を検討した. まず乖離の原因の一つとして, 化合物の固溶の効果が指摘される. 例えば, Fe_7Mo_6 には固溶領域が報告されているが, この固溶を考慮すると配置エントロピー効果によりこの構造が熱力学的に安定化する. この安定化によって Fe_2Mo が Fe と Fe_7Mo_6 の平衡に遮られて出現しなくなる可能性がある. また, 磁気変態によるエントロピー効果や格子振動の非調和項の検討も必要である. 磁気変態によるエントロピーは磁気変態温度と関連があるが, これを第一原理計算から求める手法⁹⁾がある. 一方, 非調和項は高次の力定数を求める方法¹⁰⁾¹¹⁾や第一原理分子動力学法¹²⁾¹³⁾から評価する手法が提案されている. これらの手法を導入することで自由エネルギー並びに理論状態図の計算精度を上げることができると期待される. 例えばこの研究では原子の熱振動をポテンシャルエネルギーの距離による展開において三次以上の項を無視した準調和近似によって表しているが, これを考慮することでこのわずかなエネルギーの違いを説明できる可能性がある. 実際, 純 Ag の自由エネルギーの温度依存性を準調和近似と非調和近似の間で比較してみると, 高温では非調和近似により計算した定圧熱容量は準調和近似によるそれに比べて低下する. これに伴って両者の自由エネルギーに差が現れるが, その差は, 例えば 1000K では 5kJ/mol 程度であり, 実験状態図との間のエネルギー差に相当する違いが観察される.

(7) 準安定性を克服する方法論の開拓

本研究によって, 各準安定構造のエネルギー準位と基底状態の自由エネルギー差を定量的に評価することが可能になった. この自由エネルギー差 G は, 目的の新しい準安定物質の作製において熱力学的駆動力となることから, これを計算で求めることができるようになったことは, 準安定構造の合成における重要な第一歩であると認識している. しかし, 実験的なプロセスによってこのような準安定相を作製するには, さらにもう一段高いハードルを克服しなければならない. この状況を図 4 に示したポテンシャルエネルギー-反応座標の模式図を用いて説明する. この図は, 反応物質 (a の位置) とそれよりも熱力学的に安定な生成物質 (b の位置) の相対的

なエネルギー関係を示している。このような構造変態において、変態の最初と最後の状態では、ともに原子がポテンシャルエネルギーの最小位置を占めなければならない。従ってエネルギー曲線では極大値が必ず存在し、その位置が変態の遷移状態となる。この遷移状態の存在は、準安定構造がより安定な構造へと変化することを妨げるので、それを局所的な安定状態に滞留させる原因となる。反応物質のエネルギーと遷移状態のエネルギー差を、構造遷移の活性化エネルギー U と表すことにする。変態が実際に生ずるためには、構造を構成する原子集団が、外部から与えられる熱揺動によって U 以上の余分なエネルギーを獲得する必要がある。これにより熱力学的障壁を乗り越えて変態が生ずるのである。

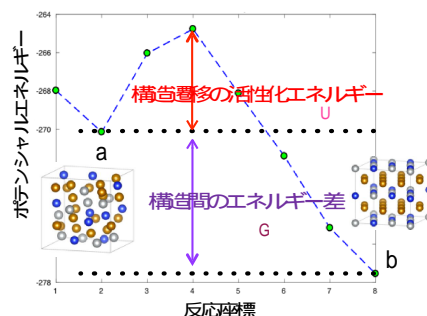


図4 ポテンシャルエネルギー-反応座標の模式図

本研究では、第一原理計算と熱力学的手法によって準安定構造の相変態における活性化エネルギーを予測する方法論について検討し、Nudged Elastic Band (NEB) 法が適用できることを確認した。さらにその結果に基づいて、目的の準安定物質の実験的合成を予備的に行った。実験ではメカニカルアロイング法を用いて金属微粉末を機械的に混合し、放電プラズマ焼結法により焼結して合成の可否を確認した。この研究は現在も継続中であり、令和三年度からの科学研究費補助金基盤研究B(一般)(課題番号 21H01602)の援助を受けて、さらに研究を深化させていく予定である。

<引用文献>

- 1) A.R. Oganov, C.W. Glass: J. Chem. Phys. 124, art. (2006) 244704.
- 2) A.R. Oganov, A.O. Lyahov, M. Valle: Acc. Chem. Res. 44, (2011) 227.
- 3) A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, Q. Zhu: Comp. Phys. Comm. 184, (2013) 1172.
- 4) S-T Lin, M. Blanco, W.A. Goddard: J. Chem. Phys., **119**(2003), 11792.
- 5) T.A. Velikanova, M.V. Karpets, S.U. Artyukh, S.O. Balanetskii, V.M. Petyukh, P.G. Agraval, and M.A. Turchanin: Powder Metall. Met. Ceram. 50 (2011) 442.
- 6) J. Cieslak, S.M. Dubiel, J. Przewoznik, and J. Tobola: Intermetallics 31 (2012) 132.
- 7) K. Takahashi, K. Ishikawa, M. Fujioka, M. Enoki, H. Ohtani: Tetsu-to-Hagané 106 (2020) 310.
- 8) A.G. Van Der Geest and A.N. Kolmogorov: Calphad, 46 (2014) 184.
- 9) C. S. Wang, R. E. Prange, and V. Korenman: Phys. Rev. B 25 (1982) 5766.
- 10) J.C. Thomas and Anton Van Der Ven: Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. 88 (2013) 1.
- 11) T. Tadano and S. Tsuneyuki: Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. 92 (2015) 1.
- 12) A. Glensk, B. Grabowski, T. Hickel, and J. Neugebauer: Phys. Rev. Lett. 114 (2015) 1.
- 13) B. Grabowski, Y. Ikeda, P. Srinivasan, F. Körmann, C. Freysoldt, A. Ian Duff, A. Shapcev, and J. Neugebauer: Npj Comput. Mater. 5 (2019). 80.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 14件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 S. Kawano, S. Iikubo, H. Ohtani	4. 巻 171
2. 論文標題 Role of substituted atoms in stacking fault formation in long-period stacking ordered system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109210
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.109210	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 林直宏, 中島一喜, 榎木勝徳, 大谷博司	4. 巻 83
2. 論文標題 Al-Cu-Mg 3元系状態図の熱力学的解析	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 378-387
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.JAW201903	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani, E. Abe	4. 巻 188
2. 論文標題 Thermodynamic origin of solute-enriched stacking-fault in dilute Mg-Zn-Y alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials and Design	6. 最初と最後の頁 108452
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matdes.2019.108452	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 高橋宏太, 石川恭平, 藤岡政昭, 榎木勝徳, 大谷博司	4. 巻 106
2. 論文標題 Fe-Mo-B 三元系状態図の熱力学的解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 309-319
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2019-097	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani, E. Abe	4. 巻 61
2. 論文標題 Formation and stability of solute enriched stacking fault in the Mg-Zn-Y, Mg-Co-Y and Mg-Zn-Ca ternary systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 839- 848
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MM2019009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 大谷博司, 榎木勝徳	4. 巻 24
2. 論文標題 鉄鋼材料の状態図に現れる二相分離とマイクロ組織	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 138-144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 佐伯成駿, 堀野祐司, Luo Jinya, 榎木勝徳, 大谷博司	4. 巻 81
2. 論文標題 Nd-Fe-Cu3元系状態図の熱力学的解析	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 32-42
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.JA201605	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Iikubo, K. Shimoyama, S. Kawano, M. Fujii, K. Yamamoto, M. Matsushita, T. Shinmei, Y. Higo, H. Ohtani.	4. 巻 8
2. 論文標題 Novel stable structure of Li3PS4 predicted by evolutionary algorithm under high-pressure	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 015008-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5011401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Michitoshi Saeki, Takako Yamashita, Hiroshi Ohtani	4. 巻 60
2. 論文標題 Thermodynamic Study on Solubility Products of Ti4C2S2 in Fe Using First-Principles Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 745-755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-274	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 佐伯成駿, 山下孝子, 大谷博司	4. 巻 106
2. 論文標題 第一原理計算を用いたTi4C2S2相溶解度積の熱力学的解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 911-923
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2020-033	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 榎木勝徳, 大澤洋平, 大谷博司	4. 巻 106
2. 論文標題 鉄-炭素系マルテンサイトにおける準安定炭化物の生成過程の熱力学的検討	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 341-350
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2019-098	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 林直宏, 中島一喜, 榎木勝徳, 大谷博司	4. 巻 84
2. 論文標題 Al-Mg-Zn三元系状態図の熱力学的解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 141 ~ 150
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.JBW201905	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Liu Yuheng, Dou Zhichao, Enoki Masanori, Oyama Yutaka, Ohtani Hiroshi	4. 巻 71
2. 論文標題 Thermodynamic assessment of the Ga-Se-Te system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 102206 ~ 102206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2020.102206	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Enoki Masanori, Takahashi Kota, Mitomi Soei, Ohtani Hiroshi	4. 巻 60
2. 論文標題 Electron Theory Calculation of Thermodynamic Properties of Steels and Its Application to Theoretical Phase Diagram of the Fe-Mo-B Ternary System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 2963 ~ 2972
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2020-189	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 H. Ohtani, M. Enoki
2. 発表標題 Study on thermodynamic properties of high entropy alloys
3. 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大谷博司, 榎木勝徳
2. 発表標題 第一原理計算による銅合金の積層欠陥エネルギーの評価
3. 学会等名 日本銅学会第59回講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 林 直宏, 榎木 勝徳, 大谷 博司
2. 発表標題 Al-Mg-Zn三元系状態図の熱力学的解析
3. 学会等名 日本金属学会 2019年秋期(第165回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大谷 博司, 榎木 勝徳
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の形成要因の熱力学的検討
3. 学会等名 日本金属学会 2019年秋期(第165回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高橋 宏太, 大谷 博司
2. 発表標題 Fe-P-C三元系状態図の熱力学的解析
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 榎木 勝徳, 大谷 博司
2. 発表標題 第一原理計算に基づくBCC-Fe中のi-sクラスターの安定性評価
3. 学会等名 日本鉄鋼協会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 宏太, 榎木 勝徳, 大谷 博司
2. 発表標題 Fe-Mo-B 三元系状態図の熱力学的解析
3. 学会等名 日本金属学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 三富崇永, 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 遺伝的アルゴリズムによる構造探索を応用した理論状態図の計算
3. 学会等名 日本金属学会秋期大会講演
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 大谷博司
2. 発表標題 状態図計算の現状と展望
3. 学会等名 日本金属学会東北支部研究発表大会 (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 モンテカルロ法を用いたaFe中の溶質原子クラスタリング過程の考察
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第179回春季講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤悠, 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 Fe-C系マルテンサイトの焼戻しにおける準安定炭化物の遷移に関する熱力学的検討
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 第179回秋季講演大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 乾 晴行	4. 発行年 2020年
2. 出版社 内田老鶴圃	5. 総ページ数 296
3. 書名 ハイエントロピー合金	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	飯久保 智 (Iikubo Satoshi) (40414594)	九州工業大学・大学院生命体工学研究科・准教授 (17104)	
研究分担者	徳永 辰也 (Tokunaga Tatsuya) (40457453)	九州工業大学・大学院工学研究院・准教授 (17104)	
研究分担者	榎木 勝徳 (Enoki Masanori) (60622595)	東北大学・多元物質科学研究所・助教 (11301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------