

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：17401
研究種目：基盤研究(C) (一般)
研究期間：2019～2022
課題番号：19K04988
研究課題名(和文) 第一原理計算でひも解く部分転位を有する合金系の相安定性の起源と溶質元素の役割

研究課題名(英文) The microscopic origin of phase stability and role of solute atoms in metal alloys having partial dislocation; A first-principles study

研究代表者
圓谷 貴夫 (Tsumuraya, Takao)

熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・准教授

研究者番号：00619869
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：輸送機器の軽量化にむけて重要な材料である高マンガン鋼および長周期積層(LPSO)構造を有する高強度マグネシウム合金を舞台に、第一原理計算手法を主たるアプローチとして、部分転位・積層欠陥を含む合金系の相安定性の起源を解明することを目的に研究を進めた。我々はFe-Mn-Si合金の繰り返し引張圧縮変形後に観察されたLPSOに類似した構造相について、未知構造探索を実施し、反強磁性秩序をもつ6H2構造が最もエネルギー的にhcp構造に近いことを見出した。さらにLPSO構造中にZn原子空孔を導入し、凸包(Convex Hull)を求めることでMg-Zn-Y合金系におけるZn原子の役割を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電子顕微鏡やアトムプローブを用いて複雑な組織や面・点欠陥が介在した材料系における電子相や界面での原子の振る舞いが直接観察できるようになっており、本研究で得られた原子空孔の安定性といった準安定状態に関する情報と実験結果を対応させることで材料特性の発現の素過程を演繹できる可能性が格段に高まっている。今後、本研究で予測された準安定構造に対する弾性係数や積層欠陥エネルギーに関する第一原理計算を実施することで、結晶塑性FEM等のマクロな計算手法との連携を可能にし、スケール間連携による力学特性の素過程の解明に迫っていきたい。

研究成果の概要(英文)：We studied the origin of the phase stability of pure-Fe and Mg-Zn-Y based alloys with long-period stacking order (LPSO) using first-principles density-functional theory (DFT) calculations. We showed how the electronic structure near the Fermi level affects the structural stability in both systems. To understand the actual stacking pattern and to discuss the possible realization of an LPSO phase as the intermediate phase between the and phases, the magnetic phase stability of various LPSO structures of pure-Fe was examined. We also discuss the origin of the phase stability of 18R Mg-Zn-Y alloys with a LPSO using first-principles DFT calculations. We calculate the heat of formation as a function of the number of Zn vacancies to discuss the role of Zn atoms. The convex hull indicates that the Zn atoms in the LPSO alloys are stable even if they number about half of the Y atoms. The bonding state with Zn p orbitals leads to the stability of the LPSO structure.

研究分野：第一原理計算

キーワード：マグネシウム合金 LPSO 原子空孔 Convex Hull 電子状態 第一原理計算 形状記憶合金 マルテンサイト変態

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本研究では、第一原理計算手法を主たるアプローチとして、部分転位・積層欠陥を含む合金系の相安定性の起源を解明し、新たな合金開発への指針を得ることを目的とする。長周期積層構造 (Long-Period Stacking Order: LPSO) 型マグネシウム合金[1]における相安定性(生成熱)に関する第一原理計算は数多く行われてきたが、形成メカニズムを紐解くことを目的として、構造安定性と原子空孔、溶質元素の関係性に着目した研究は行われていない状況にある。1960年代に鉄鋼材料の γ - ϵ マルテンサイト変態中に発見されたLPSOに類似した相[2]の具体的な結晶構造、磁性、相安定性は未だ明らかになっていない。また、純鉄のLPSO 構造に対する第一原理計算による研究もこれまで行われてこなかった。

2. 研究の目的

本研究では、次世代の自動車用薄板および航空機の軽量化にむけて重要な材料である高マンガン鋼およびLPSO構造を有する高強度マグネシウム合金を舞台に、第一原理電子状態計算手法を主たるアプローチとして、部分転位・積層欠陥を含む合金系の相安定性の起源を解明することを目的とする。部分転位・積層欠陥を含む構造を安定化させる原因が何であるのかを物性物理的な観点から解明することを目指す。

1950年代にCottrellや鈴木秀次らにより、溶質原子が母体となる面心立方格子(FCC)や六方最密充填(HCP)構造をもつ単体金属相に導入した場合、溶質元素の化学ポテンシャルが母相のものと異なるために積層欠陥/部分転位に溶質元素の偏析が生じ、転位が固着することが知られている[3,4]。

2001年に熊本大学で初めて開発された高強度マグネシウム(Mg)合金はMgにZnを0.5~2at. %, Yを2~3at. %添加した希薄合金であり、LPSO構造と呼ばれる特異的な結晶構造を有する[1]。この構造相は純マグネシウム(α -Mg)と組織を構成し、塑性加工することによって変形を起こし、延性を確保しながら機械的強度が著しく向上する。そのため世界的に研究が行われている。LPSO構造はMgがもつ六方最密充填(HCP)構造の(0001)方向に垂直な積層面内に溶質原子(ZnとY)が濃化した層が周期的に存在する[5]。さらに濃化層においてショックレー部分転位(ABCA積層)が導入され、それが(0001)方向に周期的に並んだ特異な秩序構造となっている。さらに走査透過電子顕微鏡(STEM)を用いた構造解析[5]により、ZnとY原子が $L1_2$ 型の原子クラスタを形成し、マグネシウム母相中に埋め込まれた状態にあることも報告されている[6]。LPSO構造を有するMg-Zn-Y合金は高い塑性異方性を有し、底面すべりが支配的であることが実験的にわかっている[7]。このことはLPSO構造中に $L1_2$ 型の Zn_6Y_8 クラスタが存在することと関わりがあるのではないかと考えられているが、ZnおよびYとMgとの間の具体的な結合状態(化学結合)の役割は明らかとなっていない。そこで本研究では、LPSO構造を有するMg合金の構造安定性の起源を明らかにすることを目標に研究を進めた。

3. 研究の方法

電子顕微鏡による構造解析に基づき提案されたMg-Zn-Y合金の結晶構造[7](18R型, 空間群: $C2/m$, $L1_2$ 型 Zn_6Y_8 クラスタ中心にZn配置, 中心元素:Zn)の元素組成比「Mg : Zn : Y = 58/(73-x) : (7-x)/(73-x) : 8/(73-x)」に対して、単体元素からZnの原子空孔を含む $Mg_{58}Zn_{7-x}Y_8$ が安定に生成されるか否かを第一原理計算手法に基づき調べた。図1(a)にその組成を含む状態図の拡大図を示

す。Zn原子空孔を含む各組成の構造 ($x = 1 \sim 6$: 図1(a)の★印) に対して格子パラメータを含む構造最適化を実行し、標準生成エンタルピー (ΔH) を求め、その凸包曲線 (Convex hull) から原子空孔の安定性を議論した。各空孔相において ΔH の空孔配置に対する依存性も考慮した。第一原理計算には平面波基底と Projected Augmented Plane Wave (PAW) 法に基づく擬ポテンシャルを用い、計算プログラムはオープンソースである Quantum Espresso [8] を用いた。

4. 研究成果

A) Mg-Zn-Y合金におけるZn原子空孔の安定性と電子状態：Znの役割の解明

図1(b)に生成エンタルピー (ΔH) のZn組成比依存性をプロットした。 $x = 0$ 相 ($\text{Mg}_{58}\text{Zn}_7\text{Y}_8$) の ΔH は -90meV/atom と安定であり、この点と単体金属相 ($58\text{Mg}+8\text{Y}$) を直線 (青) で結んだ。18R型構造をもつ $\text{Mg}_{58}\text{Zn}_7\text{Y}_8$ 合金に、Zn原子空孔 ($x = 1 \sim 6$) を導入した状態は青線よりもやや右側にあり、熱力学的には不安定であることが示唆される。すなわちZn空孔を含むすべての状態は $x = 0$ 相 ($\text{Mg}_{58}\text{Zn}_7\text{Y}_8$) と単体金属相 ($58\text{Mg}+8\text{Y}$) に相分離した方が安定であるといえる。しかし、図1(b)において、Zn空孔数 (x) が減少するにつれてHull distance (赤丸と青線の距離) は縮まる傾向にあることがわかる。そこでMg母体中にY-Zn溶質元素クラスタが生成された状態を考え、MgとYの比が一定でZn原子量が増加した場合の凸包曲線 (Convex hull) を図1(c)に示した。この凸包線は相分離するような高温下でなければ、 $x = 1$ (ZnとY比 = 3:4) と $x = 3$ (ZnとY比 = 1:2) の状態が出現可能であることを示唆している。一方、 $x = 4 \sim 6$ の状態は凸包から離れたエネルギー的に高い位置にあり、このような構造は実現不可能であることを示している。 $x = 2$ の状態も比較的安定な状態であるが、 $x = 1$ と $x = 3$ に分解する。以上の結果からLPSO合金中のZn原子がY原子の約半分の数までは準安定状態を形成できると考えられる。

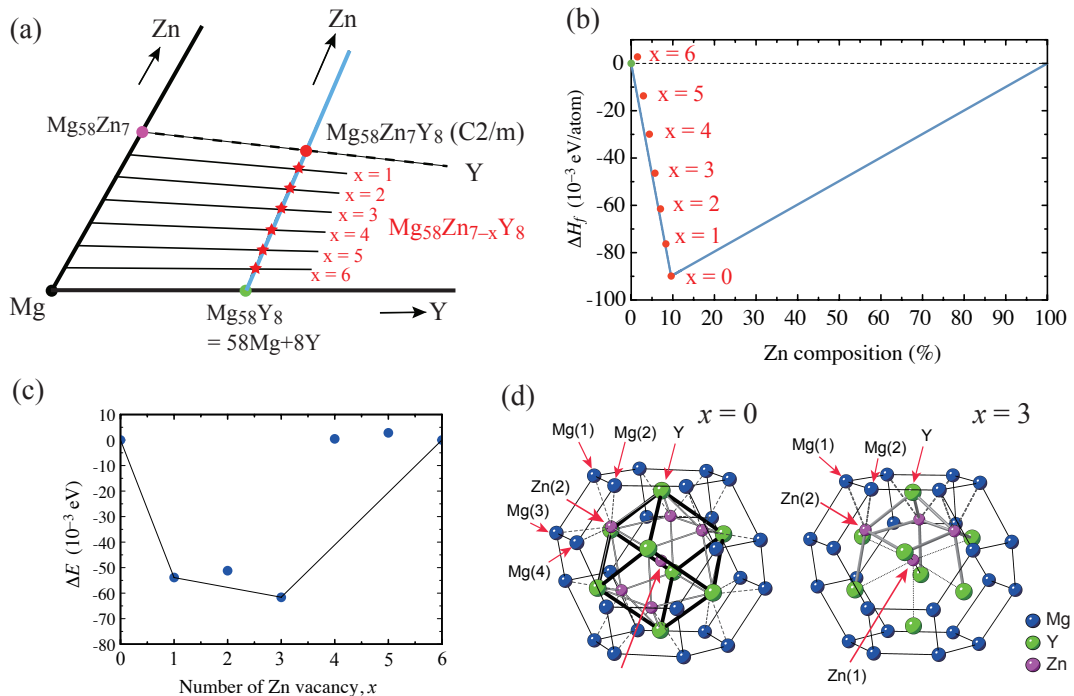


図 1 (a) Mg-Zn-Y 状態図の拡大図 (b) 生成熱の Zn 組成比依存性 (c) 生成エネルギーの Zn 空孔数依存性 (d) 18R 型 LPSO 構造における Zn_6Y_8 溶質原子クラスタと周囲の Mg 原子

次にZn原子空孔を含んだ状態の安定化の機構を明らかにするために、電子状態および結合状態の変化を調べた。一般にHCP構造を有する単体金属 (Mg, Ti, Zn等) の状態密度 (DOS: Density of states) の特徴は、フェルミ準位 (E_F) 近傍で深い谷をもち、 E_F がその最低位置に存在することであ

る [9,10]. 我々は, DOS にみられる谷の深さ, すなわち E_F を境にしたDOS の分裂の大きさが種類の異なる金属間の標準生成エンタルピー(ΔH)の差として現れることに着目した.

図1(d)に空孔を含まない状態($x=0$)と空孔数($x=3$)の場合の結晶構造を示す. 溶質原子のクラスターと周囲のMg原子のみを表示した. ここで, $L1_2$ クラスターの格子間中心原子を Zn(1), Y原子と $L1_2$ クラスターを形成しているZn原子の1つをZn(2) と定義した. 4つのMgと4つのYが四角錐を形成しZn(2)原子を共有していることがわかる($x=0$). ここでZn(2)原子に最も近い 4 つの Mg原子をMg(1)~Mg(4) と呼ぶことにする.

図2(a)に18R型構造をもつ $Mg_{58}Zn_7Y_8$ 合金($x=0$)の各原子の軌道に射影した状態密度(Partial DOS)を示す. フェルミ準位(E_F)近傍に切れ込み(擬ギャップ)があり, その最低位置は0.2 eV程度エネルギー的に高い位置にある. Zn空孔数(x)が増加すると, E_F 直上のPartial DOSの谷の深さが浅くなり, DOSの勾配がなだらかになる傾向が得られた. この傾向は $x=3$ の状態におけるZn(2)原子の p 軌道[図2(b)]において顕著にみられる. これはZn原子の p 軌道と溶質原子クラスターに最も近いMgの p 軌道の状態密度が E_F 直下-1eV付近で混成し, 結合状態[図2(b)★]を作っており, Zn空孔が導入されるとMgと合金中に残されたZn原子の間の結合が強められ, 結合状態[図2(b)★と▲]がより低エネルギー側にシフトしたためにフェルミ準位近傍のpartial DOSが減少したと理解できる. 結晶構造の観点からも溶質原子クラスターに近いMg原子とZn(2)の結合長が短くなっており, Mg(1)とZn(2)の共有結合が強まっていることと対応している. 一方, Yの d 軌道はZnの空孔数を変化させても, 大きく変化せずフェルミ準位近傍に存在しており, d^1 の占有数でZn- p 軌道と共有結合している. これらの結果からLPSO合金中においてZn原子はMgとYの間をつなぐ役割を果たしていると考えられる.

以上の結果を投稿論文にまとめ, 2022年6月にApplied Physics Express誌に掲載された[11].

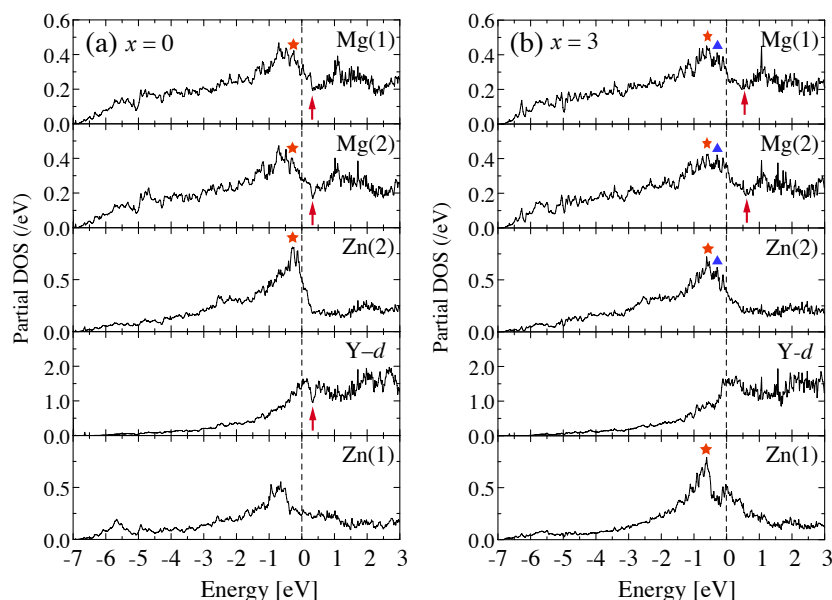


図2 Mg-Zn-Y合金の部分状態密度 (a) $x=0$ (Zn空孔なし) (b) $x=3$

B) γ - ϵ マルテンサイト変態における長周期積層(LPSO)構造の磁性と電子状態

Fe-Mn-Si系合金の示す形状記憶効果は, γ オーステナイト(fcc構造)と ϵ マルテンサイト(HCP構造)間のマルテンサイト変態と呼ばれる一次相転移現象で特徴付けられる[12]. このマルテンサイト変態は, 上記のMg-Zn-Y合金と同様, ショックレーの部分転位と呼ばれる局所的な原子構造の変化によって起こる.FCC構造の(111)面方向の積層はABCABC...であり, HCP構造の(0001)面の積層はABAB...である. すなわち, HCP積層はFCC構造中に部分転位が一原子層ご

とに走ることによって形成され、構造の相変態をもたらす。この二相の相安定性と物性は、部分転位や積層欠陥などの組織因子と結合して機能・力学特性に影響する。また、高層ビルの制振ダンパー材として実用化されているFe系形状記憶合金は、高い耐疲労性を示す。この機構には、 ϵ 相が関与した反復部分転位運動の可逆性が、疲労亀裂の進展の制御が大きな役割を果たしていることが実験で明らかとなっている[13]。この合金が繰り返し引張圧縮変形後に2H(HCP)構造である ϵ 相の3倍周期の電子線回折パターンを示すことを見いだされている。この新たな相は、1960年代にLysakらが、Fe-16%Mn-0.3%C合金に対して熱サイクルの繰り返し特性(400°C \rightleftharpoons -196°C)を調べる過程で発見した ϵ' 相と類似の構造である可能性が高く、 γ と ϵ 相の関係と同じく(111) γ に平行な(0001) ϵ' 原子面の積層構造の一種であると考えられる。

本研究では、第一原理計算手法に基づき γ , ϵ 相との相安定性を調べ、LPSO(ϵ')相がエネルギー的に中間状態(準安定構造)を取り得る可能性および、具体的な積層パターンを明らかにすることを目的に研究を進めた。6H₁と6H₂, 4H(dhcp), 10Hをもつ純鉄の構造モデルを構築し、第一原理計算により相安定性を調べた。計算には第一原理計算の中でも最も精度が高いとされる全電子FLAPW法を用いて実行した。図3に各種LPSO構造の全エネルギーの体積依存性をFCC, HCP構造と比較して示した。その結果、6H₂構造の反強磁性状態がHCP構造にエネルギー的により近いことがわかった。一方、6H₁構造は、高温相である γ -Feの反強磁性状態と同程度に不安定であることが示された。このことから ϵ' 相は、6H₂の積層構造を持つ可能性が高いと考えられる。さらに、これらの相安定性はフェルミ準位を境にした状態密度の谷の深さと密接に関係していることも見出し報告している。

以上の結果を投稿論文にまとめ、2021年9月にPhysical Review Research誌に掲載された[14]。

参考文献

- [1] Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue, and T. Masumoto, *Mater. Trans.* **42**, 1172 (2001).
- [2] L. I. Lysak and B. I. Nikolin, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **153** 812 (1963). L. I. Lysak, B. I. Nikolin, *Fiz Met. Metall* **20** (1965) 547; *ibid.* **23** (1967) 93.
- [3] H. Suzuki: *Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ. A* **4** 455 (1952).
- [4] H. Suzuki: *J. Phys. Soc. Jpn* **17** 322 (1962).
- [5] E. Abe, Y. Kawamura, K. Hayashi, and A. Inoue, *Acta Metall.* **50**, 3845 (2002).
- [6] D. Egusa, E. Abe, *Acta Mater.* **60** 166 (2012).
- [7] K. Hagihara, N. Yokotani, and Y. Umakoshi, *Intermetallics* **18** 267 (2010).
- [8] P. Giannozzi et al., *J. Phys. Cond. Matter* **29** 465901 (2017).
- [9] S. Inoue and J. Yamashita, *J. Phys. Soc. Jpn* **35** 677 (1973).
- [10] 山下次郎 固体電子論 朝倉書店 1973年
- [11] T. Tsumuraya, H. Momida, and T. Oguchi, *Appl. Phys. Express* **15** 075506 (2022)
- [12] Z. Nishiyama, *Martensitic transformation*, (London Academic Press, 1978).
- [13] T. Sawaguchi et al., *Mater. Trans.* **57** 283-293 (2016).
- [14] T. Tsumuraya, I. Watanabe, and T. Sawaguchi, *Phys. Rev. Research* **3** 033215 (2021).

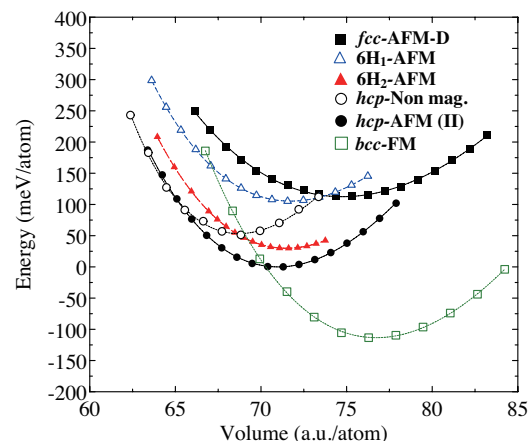


図 3:全エネルギーの体積依存性(縦軸の原点は HCP 反強磁性相の平衡体積)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Takao Tsumuraya, Ikumu Watanabe, Takahiro Sawaguchi	4. 巻 3
2. 論文標題 Origin of phase stability in Fe with long-period stacking order as an intermediate phase in cyclic - martensitic transformation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 33215
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.033215	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 Tsumuraya Takao, Momida Hiroyoshi, Oguchi Tamio	4. 巻 15
2. 論文標題 Electronic origin of phase stability in Mg-Zn-Y alloys with a long-period stacking order	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 075506 ~ 075506
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ac7b68	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 Yoneyama Naoki, Nuryadin Muhammad Khalish, Tsumuraya Takao, Iguchi Satoshi, Takei Takahiro, Kumada Nobuhiro, Nagao Masanori, Tanaka Isao, Sasaki Takahiko	4. 巻 91
2. 論文標題 Monomer Mott Insulator (BEDT-TTF)Cu[N(CN)2]2 as a Potential Nodal Line System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 113704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.113704	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 Shen Yongbing, Cui Mengxing, Takaishi Shinya, Kawasoko Hideyuki, Sugimoto Kunihisa, Tsumuraya Takao, Otsuka Akihiro, Kwon Eunsang, Yoshida Takefumi, Hoshino Norihisa, Kawachi Kazuhiko, Kasama Yasuhiko, Akutagawa Tomoyuki, Fukumura Tomoteru, Yamashita Masahiro	4. 巻 13
2. 論文標題 Heterospin frustration in a metal-fullerene-bonded semiconductive antiferromagnet	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 495
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-022-28134-w	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 Fujiyama S., Maebashi H., Tajima N., Tsumuraya T., Cui H-B., Ogata M., Kato R.	4. 巻 128
2. 論文標題 Large Diamagnetism and Electromagnetic Duality in Two-Dimensional Dirac Electron System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 27201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.128.027201	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 Yoshimi Kazuyoshi, Tsumuraya Takao, Misawa Takahiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Ab initio derivation and exact diagonalization analysis of low-energy effective Hamiltonians for $\text{Pd}(\text{dmit})_2$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.043224	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 Suzumura Yoshikazu, Tsumuraya Takao	4. 巻 90
2. 論文標題 Electric and Magnetic Responses of Two-Dimensional Dirac Electrons in Organic Conductor (BETS) ₂ I ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 124707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.124707	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 Tsumuraya Takao, Seo Hitoshi, Miyazaki Tsuyoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 First-Principles Study on the Stability and Electronic Structure of the Charge-Ordered Phase in BEDT-TTF ₂ I ₃	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 1109 ~ 1109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst11091109	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 Tsumuraya Takao, Seo Hitoshi, Miyazaki Tsuyoshi	4. 巻 101
2. 論文標題 First-principles study of the charge ordered phase in $\text{-D3(Cat-EDT-TTF/ST)}_2$: Stability of electron deuterium coupled ordering in hydrogen-bonded molecular conductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 45114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.045114	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 Suzumura Yoshikazu, Tsumuraya Takao, Kato Reizo, Matsuura Hiroyasu, Ogata Masao	4. 巻 88
2. 論文標題 Role of Velocity Field and Principal Axis of Tilted Dirac Cones in Effective Hamiltonian of Non-Coplanar Nodal Loop	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 124704 ~ 124704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/jpsj.88.124704	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 Cui Hengbo, Tsumuraya Takao, Yeung Hamish H.-M., Coates Chloe S., Warren Mark R., Kato Reizo	4. 巻 24
2. 論文標題 High Pressure Crystal Structure and Electrical Properties of a Single Component Molecular Crystal $[\text{Ni(ddd)}_2]$ (ddd = 5,6-dihydro-1,4-dithiin-2,3-dithiolate)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1843 ~ 1843
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules24101843	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20件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 圓谷貴夫, 渡邊育夢, 澤口孝宏, 初田浩義, 小口多美夫
2. 発表標題 Fe系 - マルテンサイト変態とMg-Zn-Y合金における長周期積層構造の安定性の解明
3. 学会等名 軽金属学会2021年春季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Hiroyoshi Momida, Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-Principles Study on the Stability of Vacancy Formation in a Mg-Zn-Y Alloy with Long-period Stacking Ordered Structure
3. 学会等名 12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (Mg 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 圓谷貴夫、西本宗矢、河村能人
2. 発表標題 Mg-Zn-Y系合金における溶質元素効果：第一原理分子動力学法による原子ダイナミクスの解明
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 西本宗矢、圓谷貴夫、山崎倫昭、河村能人
2. 発表標題 Mg-Zn-Y系急速凝固合金の組織形成に及ぼす冷却速度の影響
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya
2. 発表標題 First-Principles Study on the Origin of Stability of Long-Period Stacking Order in a Mg-Zn-Y based alloy
3. 学会等名 The 3rd NIMS MANA-ICYS Reunion Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 圓谷貴夫, 渡邊育夢, 澤口孝宏
2. 発表標題 Fe系 - マルテンサイト変態におけるLPSO型構造相の安定性と起源解明
3. 学会等名 日本金属学会 2021年春期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 圓谷貴夫, 初田浩義, 小口多美夫
2. 発表標題 LPSO型Mg-Zn-Y合金における溶質原子空孔の安定性に関する第一原理計算
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 圓谷貴夫, 小口多美夫
2. 発表標題 第一原理計算によるLPSO構造を有するMg合金の相安定性の起源解明
3. 学会等名 日本金属学会 2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 圓谷貴夫, 初田浩義, 小口多美夫
2. 発表標題 LPSO型Mg-Zn-Y合金における原子空孔と相安定性に関する第一原理研究
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 The origin of structural stability and solute clustering in Mg-M-Y (M = Ni, Cu, Co, and Zn) alloys with long-period stacking ordered structure
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-principles study on the origin of phase stability of long-period stacking ordered (LPSO) structure in Mg-M-Y (M = Ni, Cu, Co, and Zn) alloys
3. 学会等名 International Conference of Materials Modeling (ICMM6)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-principles study on the origin of structural stability of Mg-M-Y (M = Ni, Cu, Co, and Zn) alloys with long-period stacking ordered structure
3. 学会等名 2019 Sustainable Industrial Processing Summit and Exhibition
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Hiroyoshi Momida, Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-Principles Study on the Electronic Origin of Phase Stability in Mg-Zn-Y alloys with a Long-Period Stacking Order
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-feuille Structure (LPSO/MFS2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林拓海, 圓谷貴夫, 山崎倫昭
2. 発表標題 表面電位測定と第一原理計算の連携による -Mg/LPSO二相Mg系合金における相間電位差の制御
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 圓谷 貴夫、初田 浩義、小口 多美夫
2. 発表標題 LPSO構造型Mg-Zn-Y合金におけるZn原子の役割：第一原理計算による研究
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 圓谷 貴夫、西本 宗矢、河村 能人
2. 発表標題 第一原理分子動力学法によるMg-Zn-Y合金の熔融金属および過冷却液体状態における原子ダイナミクスの解明
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Hiroyoshi Momida, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-Principles Study on the Origin of Phase Stability in Mg-Zn-Y alloys with a Long-Period Stacking Order
3. 学会等名 Korea-Japan Joint Seminar "Scientific research and technology application for Mg-based alloys and other light metals" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Hiroyoshi Momida, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 Electronic Origin of Phase Stability in Mg-Zn-Y alloys with a Long-Period Stacking Order: A First-Principles Study
3. 学会等名 TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Hiroyoshi Momida, and Tamio Oguchi
2. 発表標題 First-Principles Study on the Electronic Origin of Phase Stability in Mg alloys with a Long-Period Stacking Order
3. 学会等名 V4-Japan project meeting : Development of Advanced Magnesium Alloys for Multifunctional Applications in Extreme Environments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takao Tsumuraya, Soya Nishimoto, and Yoshihito Kawamura
2. 発表標題 First-Principles Molecular Dynamics Study on the Icosahedral Cluster Formation in A Supercooled Liquid of LPSO-type Mg-Zn-Y alloys
3. 学会等名 Taiwan-Japan Advanced Light Metals [Mg & Ti based] Workshop 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔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
---------	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------