

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 5 月 27 日現在

機関番号：14401

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2018～2022

課題番号：18H05453

研究課題名（和文）計算材料科学によるハイエントロピー合金の力学特性の解明と制御

研究課題名（英文）Modeling and simulation on mechanical properties of high entropy alloys

研究代表者

尾方 成信（Ogata, Shigenobu）

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：20273584

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 153,800,000円

研究成果の概要（和文）：ハイエントロピー合金の力学特性に現れるハイエントロピー効果の発現メカニズムを、計算科学的手法を用いて、様々な観点から根源的に解明した。具体的な成果は以下の通り。ハイエントロピー合金のニューラルネットワークポテンシャルの構築、ハイエントロピー合金の化学秩序構造と構造の形成動力学の解明、ハイエントロピー合金の特異な転位構造とそれがもたらす力学特性の解明、ハイエントロピー合金における粒界特性の解明、腐食環境下におけるハイエントロピー合金の力学特性の解明、ハイエントロピー合金の結晶塑性有限要素モデル構築、ハイエントロピー合金における原子構造と原子間多体相互作用の関係の理論的解明。

研究成果の学術的意義や社会的意義

強度・延性のバランス、高温強度・低温靱性などの優れた機械的特性を有し、次世代構造材料として期待され、世界中で盛んに研究開発がなされているハイエントロピー合金を研究対象とし、計算科学的手法を用いて、ハイエントロピー合金が有する優れた特性の起源の数々を明らかにした。成果のほとんどはハイエントロピー合金のみならず、合金一般に適用できるものであり、長い歴史がある合金研究でも未解明であったものが多い。まさに合金のサイエンスを確立し、合金研究にブレークスルーをもたらしたと言える。

研究成果の概要（英文）：The mechanism by which the high-entropy effect manifests in the mechanical properties of high-entropy alloys was fundamentally elucidated from various perspectives using computational science methods. The specific achievements are as follows:

1. Construction of a neural network potential for high-entropy alloys.
2. Clarification of the chemical order structure and the dynamics of structure formation in high-entropy alloys.
3. Elucidation of the unique dislocation structures in high-entropy alloys and their impact on mechanical properties.
4. Investigation of grain boundary characteristics in high-entropy alloys.
5. Clarification of the mechanical properties of high-entropy alloys under corrosive environments.
6. Development of a crystal plasticity finite element model for high-entropy alloys.
7. Theoretical clarification of the relationship between atomic structure and multi-body interactions in high-entropy alloys.

研究分野：計算材料科学、計算力学

キーワード：ハイエントロピー合金 力学特性 計算材料科学

1. 研究開始当初の背景

構造材料として用いられる合金の多くは、ある1種類の特定期元素を主要元素(ベース)としてそこに少量の合金元素を添加したものであり、代表的なものにFe基合金、Ni基合金などがある。構造材料の場合、合金化の主目的は力学特性の制御である。数%程度の少量添加の範囲では、添加量に対して力学特性が線形に近い応答をするため力学特性を予測しやすく、経験的な力学特性の制御が容易である。その一方で主要元素の存在を前提とした合金設計戦略は、設計自由度が低く力学特性の制御範囲に限られる。このため既に莫大な合金開発研究が展開された今では、全く新奇で特異な力学特性を有する合金の創出は期待できない。これに対して近年ハイエントロピー合金と呼ばれる新しいコンセプトの高濃度多元固溶体合金系材料が注目されている。主要元素を持たず5種類を目安とする多種の元素が等原子分率で固溶している合金系である。ハイエントロピー合金では、従来合金には見られない特異で優れた力学特性を示すものがいくつも発見されている。例えば低温で非常に強度が高くしかも同時に韌性も高いFCC型CrMnFeCoNi合金、高温になっても強度がほとんど低下しない耐熱性合金(BCC型VNbMoTaW合金)、疲労特性に優れた合金(FCC型AlCrFeCoNiCu合金)、耐食性に優れた合金(FCC型FeCoNiCuSn合金)、耐摩耗性に優れた合金(FCC型AlCrFeMnNi合金)などがある。相次ぐ新発見はハイエントロピー合金の設計自由度が従来合金に比べて飛躍的に高いことに起因しており、まだ発見されていない極めて優れた力学特性を有する合金の存在を強く期待させる。しかし現状では、ハイエントロピー合金設計に2つの問題点がある。まず、1) 設計自由度が膨大で新しい合金系である故に、使える経験則が皆無であること。そして、2) 優れた力学特性発現の理由が根本的に明らかになっていない。

2. 研究の目的

局所電子・原子構造が種々の格子欠陥特性に与える影響、各種格子欠陥の振る舞いとマクロ力学特性との関連について重点的に探求し、ハイエントロピー合金の力学特性に現れるハイエントロピー効果の発現メカニズムを根源的に解明する。

3. 研究の方法

第一原理計算、分子動力学計算、有限要素計算などの各種計算手法を用いる。

4. 研究成果

(1) ハイエントロピー合金のニューラルネットワークポテンシャルの構築：ハイエントロピー合金の高精度分子動力学解析を目指す上で最大のボトルネックとなっていた原子間相互作用の問題を解決するために、代表的な合金系(FCC CrCoNi および BCC MoNbTa, ZrNbTa)に対し、ニューラルネットワークを活用した世界初の原子間相互作用を構築した(図1)。

第一原理計算精度による大規模原子シミュレーションが可能となり、後述する世界初の化学秩序形成動力学解析を実現させるブレークスルーをもたらした。(班内共同研究)

(2) ハイエントロピー合金の化学秩序構造と構造の形成動力学の解明：第一原理計算精度を有するニューラルネットワーク原子間相互作用と、機械学習によって高速化された新開発の動的モンテカルロ法を用いて、CrCoNi合金が化学秩序構造を発現することを立証し、その原子構造の具体と、温度依存性、形成速度の解明に世界で初めて成功した(図2)。さらに、ナノインデンテーション原子シミュレーションによって化学秩序形成が局所変形の力学強度を変化させることを示した。(A01, A03 班との共同研究)

(3) ハイエントロピー合金の特異な転位構造とそれがもたらす力学特性の解明：代表的BCCハイエントロピー合金VNbMoTaWとTiZrNbHfTaのらせん転位の

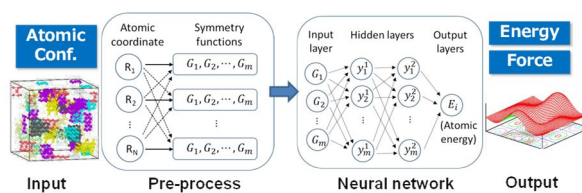


図1. ニューラルネットワークポテンシャル。

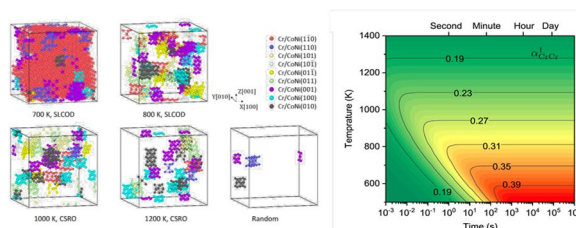


図2. 化学秩序構造と構造の形成動力学。

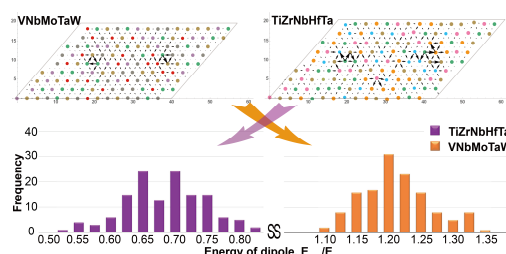


図3. BCCハイエントロピー合金の転位芯構造。

規模第一原理計算を実施し、前者の転位はコンパクトで後者は拡張し、後者の転位芯エネルギーは弾性論予測より著しく低いことがわかった(図3)。また、転位運動のエネルギー障壁を評価し、HCP元素(Zr)の濃度が、すべり面を(110)面から(112)面に変化させることがわかった。これにより、実験で観察される両者のマクロなすべり変形の違いが、構成元素に由来することが解明され、構成元素の濃度制御により力学特性の設計が可能になることが示された。(都留, 尾方, 下川の共同研究, A01班との共同研究)

(4) ハイエントロピー合金における粒界特性の解明: 分子動力学解析により、粒界偏析によって粒界自由体積が減少し、粒界からの転位放出が困難になることで、多結晶ハイエントロピー合金の強度が上がることを解明した(図4)。粒界の移動速度を2元系合金と比較し、多成分性がもたらす格子ひずみが粒界の移動を抑制していることを明らかにした。さらに、粒界偏析を精度良くかつ高速に解析することを可能とする世界初のデータベース駆動型セミグランドカノニカルモンテカルロ法の開発に成功した。(下川, 久保, 青柳, 尾方の共同研究, A03班との共同研究)

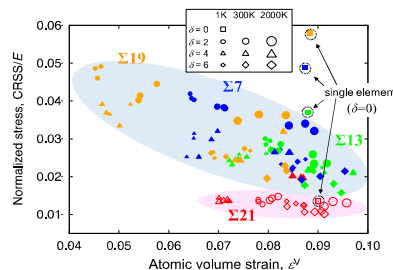


図4 強度(CRSS)と原子サイズの関係。

(5) 腐食環境下におけるハイエントロピー合金の力学特性の解明: 反応分子動力学法を活用することで、FeNiCr合金の高温水環境での引張シミュレーションを行い、真空環境では引張荷重下でFeNiCr合金に積層欠陥が生じて高い延性を示すが、高温水環境では表面酸化が積層欠陥生成を抑制し、延性が低下することを解明した。

(6) ハイエントロピー合金の結晶塑性有限要素モデル構築: ハイエントロピー合金の双晶変形を連続体レベルで表現する数理モデルを構築し、有限要素解析を行った。双晶の核生成, 成長, 双晶における転位密度上昇が再現され。双晶における緩和変形が転位密度上昇の要因であることが示唆された。(班内共同研究)

(7) ハイエントロピー合金における原子構造と原子間多体相互作用の關係の理論的解明: 力学特性と密接に関連する、熱平衡状態でのハイエントロピー合金の安定な原子構造と原子間多体相互作用の間の非線型性について、理論面からその本質を解明した。非線型性は局所的な自由度の拘束(ガウスからのズレ), 自由度間の非自明な相互作用(自由度間のもつれ), および相互作用の非加法性(もつれの非加法性)の3つの寄与のKullback-Leibler divergenceの和に必ず分解でき、この非加法性が構成元素数が3以上の合金に特有のカクテル効果であることを解明した。熱浴との相互作用で状態遷移した多元合金の獲得する非線型性の情報は、熱浴から系に流入した熱と等価であることを解明した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計68件（うち査読付論文 67件 / うち国際共著 15件 / うちオープンアクセス 10件）

1. 著者名 Tsuru Tomohito, Lobzenko Ivan, Wei Daixiu	4. 巻 30
2. 論文標題 Synergetic effect of Si addition on mechanical properties in face-centered-cubic high entropy alloys: a first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 024003 ~ 024003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/ac455a	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 Yu Peijun, Du Jun-Ping, Shinzato Shuhei, Meng Fan-Shun, Ogata Shigenobu	4. 巻 224
2. 論文標題 Theory of history-dependent multi-layer generalized stacking fault energy: A modeling of the micro-substructure evolution kinetics in chemically ordered medium-entropy alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 117504 ~ 117504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.117504	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 Tsuru Tomohito, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Watanabe Chihiro, Miura Hiromi	4. 巻 203
2. 論文標題 Dislocation core structure and motion in pure titanium and titanium alloys: A first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111081 ~ 111081
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2021.111081	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 Wei Daixiu, Wang Liqiang, Zhang Yongjie, Gong Wu, Tsuru Tomohito, Lobzenko Ivan, Jiang Jing, Harjo Stefanus, Kawasaki Takuro, Bae Jae Wung, Lu Wenjun, Lu Zhen, Hayasaka Yuichiro, Kiguchi Takanori, Okamoto Norihiko L., Ichitsubo Tetsu, Kim Hyoung Seop, Furuhashi Tadashi, Ma Evan, Kato Hidemi	4. 巻 225
2. 論文標題 Metalloid substitution elevates simultaneously the strength and ductility of face-centered-cubic high-entropy alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 117571 ~ 117571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.117571	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 該当する

1. 著者名 Shiihara Yoshinori, Kanazawa Ryosuke, Matsunaka Daisuke, Lobzenko Ivan, Tsuru Tomohito, Kohyama Masanori, Mori Hideki	4. 巻 207
2. 論文標題 Artificial neural network molecular mechanics of iron grain boundaries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114268 ~ 114268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114268	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 Yuge Koretaka	4. 巻 91
2. 論文標題 Nonlinearity in Canonical Ensemble for Multicomponent Alloys Revisited from Structural Degree of Freedoms	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 14082
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.014802	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 Xie Hongxian, Wei Gaobing, Lu Yuanfang, Du Junping, Yin Fuxing, Lu Guang-Hong, Ogata Shigenobu	4. 巻 101
2. 論文標題 Driving force of zero-macroscopic-strain deformation twinning in face-centred-cubic metals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Philosophical Magazine	6. 最初と最後の頁 2318 ~ 2330
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14786435.2021.1971317	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 該当する

1. 著者名 Chen Qian, Zhang Jing, Liu Zhongmin, Wang Yang, Ootani Yusuke, Xu Jingxiang, Ozawa Nobuki, Kubo Momoji	4. 巻 202
2. 論文標題 Heterogeneous yielding mechanisms of body centered cubic iron for high resistance to chemical reaction-induced deterioration in supercritical water environments: A reactive molecular dynamics study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 113997 ~ 113997
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.113997	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 Campos Rodrigo Pinheiro, Shinzato Shuhei, Ishii Akio, Nakamura Shuichi, Ogata Shigenobu	4. 巻 104
2. 論文標題 Database-driven semigrand canonical Monte Carlo method: Application to segregation isotherm on defects in alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 25310
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.104.025310	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 Zeqi, Du Jun-Ping, Shinzato Shuhei, Sato Yuji, Yu Peijun, Ogata Shigenobu	4. 巻 198
2. 論文標題 Kinetic Monte Carlo simulation framework for chemical short-range order formation kinetics in a multi-principal-element alloy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 110670 ~ 110670
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2021.110670	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 Lin W.T., Chen D., Dang C.Q., Yu P.J., Wang G., Lin J.H., Meng F.L., Yang T., Zhao Y.L., Liu S.F., Du J.P., Yeli G.M., Liu C.T., Lu Y., Ogata S., Kai J.J.	4. 巻 210
2. 論文標題 Highly pressurized helium nanobubbles promote stacking-fault-mediated deformation in FeNiCoCr high-entropy alloy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116843 ~ 116843
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.116843	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 Ohta Shouno, Miyake Ryogo, Yuge Koretaka	4. 巻 90
2. 論文標題 Configurational Geometry Bridges Equilibrium Structure Information from a Single to Multiple Compositions for Binary Discrete Systems	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 034801 ~ 034801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.034801	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 Liao Heting, Kimizuka Hajime, Ishii Akio, Du Jun-Ping, Ogata Shigenobu	4. 巻 210
2. 論文標題 Nucleation kinetics of the beta'' precipitate in dilute Mg-Y alloys: A kinetic Monte Carlo study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114480 ~ 114480
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114480	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 Miura Hiromi, Watanabe Chihiro, Aoyagi Yoshiteru, Oba Yojiro, Kobayashi Masakazu, Yoshinaga Naoki	4. 巻 833
2. 論文標題 Age-hardening mechanisms of heterogeneous-nanostructured SUS316LN stainless steel fabricated by heavy cold rolling	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Science and Engineering: A	6. 最初と最後の頁 142531 ~ 142531
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.msea.2021.142531	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 Si Mian, Ishii Akio, Mi Shao Bo, Ogata Shigenobu, Li Ju, Han Wei Zhong	4. 巻 18
2. 論文標題 Dislocation Mediated Hydride Precipitation in Zirconium	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Small	6. 最初と最後の頁 2105881 ~ 2105881
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/smll.202105881	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 該当する

1. 著者名 Zheng Sixue, Shinzato Shuhei, Ogata Shigenobu, Mao Scott X.	4. 巻 158
2. 論文標題 Experimental molecular dynamics for individual atomic-scale plastic events in nanoscale crystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 104687 ~ 104687
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmps.2021.104687	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 Wang Xiang, Zheng Sixue, Shinzato Shuhei, Fang Zhengwu, He Yang, Zhong Li, Wang Chongmin, Ogata Shigenobu, Mao Scott X.	4. 巻 12
2. 論文標題 Atomistic processes of surface-diffusion-induced abnormal softening in nanoscale metallic crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5237-1-9.
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-25542-2	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 該当する

1. 著者名 Hu Yong-Jie, Sundar Aditya, Ogata Shigenobu, Qi Liang	4. 巻 210
2. 論文標題 Screening of generalized stacking fault energies, surface energies and intrinsic ductile potency of refractory multicomponent alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116800 ~ 116800
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.116800	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 該当する

1. 著者名 Jiang Hua, Watanabe Chihiro, Miyajima Yoji, Koga Norimitsu, Aoyagi Yoshiteru, Kobayashi Masakazu, Miura Hiromi	4. 巻 815
2. 論文標題 Effects of strain rate on mechanical properties of heterogeneous nano-structured SUS316LN stainless steel: Revealed by in-situ X-Ray diffraction at synchrotron radiation facility	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materials Science and Engineering: A	6. 最初と最後の頁 141251 ~ 141251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.msea.2021.141251	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 都留智仁	4. 巻 60
2. 論文標題 原子シミュレーションに基づく力学特性評価と材料設計	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 あたりあ	6. 最初と最後の頁 25-29
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.60.25	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 K. Ito, H. Sawada, S. Tanaka, S. Ogata and M. Kohyama	4. 巻 29
2. 論文標題 Electronic origin of grain boundary segregation of Al, Si, P, and S in bcc-Fe: Combined analysis of ab initio local energy and crystal orbital Hamilton population	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 015001-1-23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/abc04c	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 K. Yuge, R. Miyake, S. Ohta	4. 巻 89
2. 論文標題 Special Microscopic-States-Basis Representation of Macroscopic Structure for Discrete Thermodynamic Systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 094803-1-3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.094803	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 K. Yuge	4. 巻 45
2. 論文標題 Accurate Prediction of Potential Energy Surface via Thermodynamically Equilibrium Structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Trans. Mat. Res. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 139-141
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14723/tmrsj.45.139	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 Y. Sato, S. Shinzato, T. Ohmura, T. Hatano, and S. Ogata	4. 巻 11
2. 論文標題 Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4177-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-17918-7	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 J.-P. Du, W. T. Geng, K. Arakawa, J. Li and S. Ogata	4. 巻 11
2. 論文標題 Hydrogen-enhanced Vacancy Diffusion in Metals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 7015-7020
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c01798	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 該当する

1. 著者名 K. Shiotani, T. Niiyama, T. Shimokawa	4. 巻 61
2. 論文標題 Dislocation Emission from Grain Boundaries in High-Entropy Alloys: Influence of Atomic Composition at Grain Boundaries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 1271-1279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.Z-M2020819	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 K. Niitsu, M. Asakura, K. Yuge, H. Inui	4. 巻 61
2. 論文標題 Prediction of face-centered cubic single-phase formation for non-equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high-entropy alloys using valence electron concentration and mean-square atomic displacement	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 1874-1880
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2020144	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 K. Yuge, S. Ohta	4. 巻 89
2. 論文標題 Tropical Limit for Configurational Geometry in Discrete Thermodynamic Systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 084802-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.084802	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 T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H. Toda	4. 巻 10
2. 論文標題 Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminum alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 1998-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-58834-6	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 S. Yamamoto, Y. Miyajima, C. Watanabe, R. Monzen, T. Tsuru, H. Miura	4. 巻 61
2. 論文標題 Dependences of Grain Size and Strain-Rate on Deformation Behavior of Commercial Purity Titanium Processed by Multi-Directional Forging	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 2320-2328
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2020263	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 T. Suzudo, K. Ebihara, T. Tsuru	4. 巻 10
2. 論文標題 Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in α -iron: A molecular dynamics study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 115209-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0026659	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 K. Yuge, T. Taikei, K. Oku, S. Ohta, K. Takeuchi	4. 巻 45
2. 論文標題 Landscape of Configurational Density of States for Discrete Systems at Equicomposition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Trans. Mat. Res. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 163-166
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14723/tmrsj.45.163	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 R. Zheng, J.-P. Du, S. Gao, H. Somekawa, S. Ogata, N. Tsuji	4. 巻 198
2. 論文標題 Transition of dominant deformation mode in bulk polycrystalline pure Mg by ultra-grain refinement down to sub-micrometer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 35-46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2020.07.055	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 該当する

1. 著者名 A. Bendo, K. Matsuda, K. Nishimura, N. Nunomura, T. Tsuchiya, S. Lee, C. D. Marioara, T. Tsuru, M. Yamaguchi, K. Shimizu, H. Toda	4. 巻 36
2. 論文標題 The possible transition mechanism for the meta-stable phase in the 7xxx aluminium	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Science and Technology	6. 最初と最後の頁 1621-1627
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/02670836.2020.1821323	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 H. Somekawa, D. A. Basha, A. Singh, T. Tsuru, H. Watanabe	4. 巻 100
2. 論文標題 Change in damping capacity arising from twin-boundary segregation in solid-solution magnesium alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Philosophical Magazine Letters	6. 最初と最後の頁 494-505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/09500839.2020.1805132	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 小林正和, 岩間翔平, 渡邊千尋, 青柳吉輝, 三浦博己	4. 巻 106
2. 論文標題 強冷間圧延によりヘテロナノ組織を発達させたSUS316LNステンレス鋼板材の疲労特性	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 507-516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2019-130	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 Y. Li, R. Li, Q. peng, S. Ogata	4. 巻 31
2. 論文標題 Reduction of dislocation, mean free path, and migration barriers by high entropy alloy: insights from atomistic study of irradiation damage of CoNiCrFeMn	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 425701-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6528/ab9cf5	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 該当する

1. 著者名 H. Somekawa, D. A. Basha, A. Singh, T. Tsuru: M. Yamaguchi	4. 巻 61
2. 論文標題 Non-Basal Dislocation Nucleation Site of Solid Solution Magnesium Alloy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 1172-1175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2020040	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 N. Koga, S. Suzuki, H. Jiang, C. Watanabe, Y. Aoyagi, M. Kobayashi, H. Miura	4. 巻 55
2. 論文標題 Characterization of Heterogeneous-nano Structure in Austenitic Stainless Steel: Crystal Orientations and Hardness Distribution	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 9299-9310
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10853-020-04643-1	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 塩谷光平, 新山友暁, 下川智嗣	4. 巻 69
2. 論文標題 ハイエントロピー合金における粒界からの転位放出現象: 粒界を構成する原子組成の不均質性の影響	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 141-148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.69.141	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 T. Tsuru, M. Wakeda, T. Suzudo, M. Itakura, S. Ogata	4. 巻 127
2. 論文標題 Anomalous solution softening by unique energy balance mediated by kink mechanism in tungsten-rhenium alloys	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 025101-0-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5131279	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 P. Yu, R. Feng, J. -P. Du, S. Shinzato, J. -P. Chou, B. Chen, Y. -C. Lo, P. K. Liaw, S. Ogata, A. Hu	4. 巻 181
2. 論文標題 Phase transformation assisted twinning in a face-centered-cubic FeCrNiCoAl _{0.36} high entropy alloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 491-500
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.10.012	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 該当する

1. 著者名 T. Niiyama, M. Wakeda, T. Shimokawa, S. Ogata	4. 巻 100
2. 論文標題 Structural relaxation affecting shear-transformation avalanches in metallic glasses	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 043002-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.100.043002	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 D. -G. Xie, Z. -Y. Nie, S. Shinzato, Y. -Q. Yang, F. -X. Liu, S. Ogata, J. Li, E. Ma, Z. -W. Shan	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlled growth of single-crystalline metalnanowires via thermomigration across a nanoscale junction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4478-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-12416-x	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 該当する

1. 著者名 K. Yuge, S. Ohta	4. 巻 88
2. 論文標題 Bidirectional-Stability Breaking in Thermodynamic Average for Classical Discrete Systems	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 104803-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.104803	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 Y. Sato, S. Shinzato, T. Ohmura, S. Ogata	4. 巻 121
2. 論文標題 Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 280-292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.06.012	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 K. Yuge, S. Ohta	4. 巻 88
2. 論文標題 Microscopic Geometry Rules Ordering Tendency for Multicomponent Disordered Alloys	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 054803-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.054803	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 K. Yuge, S. Ohta, T. Setoyama, R. Miyake	4. 巻 6
2. 論文標題 Anharmonicity in Structural Degree of Freedom: A Central Key Bidirectional Stability in Thermodynamic Average	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AMTC letters	6. 最初と最後の頁 232-233
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 R. Miyake, S. Ohta, K. Yuge	4. 巻 6
2. 論文標題 Efficient Construction of Special Microscopic States for Thermodynamically Equilibrium State Based on Singular Value Decomposition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AMTC letters	6. 最初と最後の頁 162-163
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. Ohta, K. Yuge	4. 巻 6
2. 論文標題 Systematic, Exact Formulation of Multivariate Moments for Configurational Geometry in Crystalline Solids	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AMTC letters	6. 最初と最後の頁 234-235
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 T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H. Toda	4. 巻 10
2. 論文標題 Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminium alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 (1-8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-58834-6	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 L. Wang, C. Feng, M. -D. Cao, F. Meng, Y. -K. Li, J. -J. Yin, B. -H. Li, S. Ogata, W. -T. Geng, G. -H. Yu	4. 巻 495
2. 論文標題 Synergistic effect of lattice strain and Co doping on enhancing thermal stability in Fe16N2 thin film with high magnetization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 165873-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2019.165873	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. Shinzato, M. Wakeda, S. Ogata	4. 巻 122
2. 論文標題 An atomistically informed kinetic Monte Carlo model for predicting solid solution strengthening of body-centered cubic alloys	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 319-337
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.03.004	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 H. Miyoshi, H. Kimizuka, A. Ishii, S. Ogata	4. 巻 179
2. 論文標題 Temperature-dependent nucleation kinetics of Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys: An atomistic kinetic Monte Carlo and classical nucleation theory approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 262-272
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.08.032	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 P. -J. Yang, Q. -J. Li, T. Tsuru, S. Ogata, J. -W. Zhang, H. -W. Sheng, Z. -W. Shan, G. Sha, W. -Z. Han, J. Li, E. Ma	4. 巻 168
2. 論文標題 Mechanism of hardening and damage initiation in oxygen embrittlement of body-centred-cubic niobium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 331-342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.02.030	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 該当する

1. 著者名 T. Tsukuda, Y. Aoyagi	4. 巻 -
2. 論文標題 Modeling of twinning-induced plasticity of high entropy alloy based on crystal plasticity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing	6. 最初と最後の頁 866-871
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 Y. Aoyagi, A. Sagara, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka, H. Miura	4. 巻 -
2. 論文標題 Multiscale simulation based on macroscopic deformation model predicted by microstructure information of ultrafine-grained metals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing	6. 最初と最後の頁 879-885
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 都留智仁	4. 巻 1
2. 論文標題 マグネシウムの延性・韌性向上のための合金設計：第一原理計算からのアプローチ	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 軽金属	6. 最初と最後の頁 -
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 無
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 Koretaka Yuge, and Shouno Ohta	4. 巻 88
2. 論文標題 A Single Microscopic State to Characterize Ordering Tendency in Discrete Multicomponent Systems	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 044803-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.044803	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 Shouno Ohta, and Koretaka Yuge	4. 巻 88
2. 論文標題 Exact Formulation of Moments for Density of States on Multisite Correlation Function under Constant Composition	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 034802-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.034802	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 X. Xie, Y. Lo, Y. Tong, J. Qiao, G. Wang, S. Ogata, H. Qi, K.A. Dahmen, Y. Gao, P. K. Liaw	4. 巻 124
2. 論文標題 Origin of serrated flow in bulk metallic glasses	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 634-642
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmps.2018.11.015	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 該当する

1. 著者名 渡邊千尋, 小林秀平, 青柳吉輝, 戸高義一, 小林正和, 杉浦夏子, 吉永直樹, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 冷間強圧延したSUS316LN鋼のヘテロナノ組織とその形成過程	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 254-261
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-075	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 青柳吉輝, 渡邊千尋, 小林正和, 戸高義一, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 強圧延誘起ヘテロナノ組織がオーステナイト系ステンレス鋼の力学特性に与える影響に関する結晶塑性シミュレーション	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 262-271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-078	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 山崎恭和, 小林正和, 戸高義一, 渡邊千尋, 青柳吉輝, 三浦博己	4. 巻 105
2. 論文標題 冷間強圧延によりヘテロナノ組織を付与した二相ステンレス鋼の疲労破壊	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 272-281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-080	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 Liang Wan, Wen Tong Geng, Akio Ishii, Jun-Ping Du, Qingsong Mei, Nobuyuki Ishikawa, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata	4. 巻 112
2. 論文標題 Hydrogen embrittlement controlled by reaction of dislocation with grain boundary in alpha-iron	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 206-219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2018.08.013	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 該当する

1. 著者名 Guo-Jie Jason Gao, Yun-Jiang Wang, Shigenobu Ogata	4. 巻 9
2. 論文標題 Incorporating a soft ordered phase into an amorphous configuration enhances its uniform plastic deformation under shear	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 015329-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5064499	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 該当する

1. 著者名 Y. Aoyagi, A. Sagara, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka and H. Miura	4. 巻 941
2. 論文標題 Crystal Plasticity Simulation Considering Microstructures of Austenitic Stainless Steel on Macroscopic Yield Function	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materials Science Forum	6. 最初と最後の頁 212-217
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4028/www.scientific.net/MSF.941.212	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 Yun-Jiang Wang, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Lan-Hong Dai and Shigenobu Ogata	4. 巻 157
2. 論文標題 A free energy landscape perspective on the nature of collective diffusion in amorphous solids	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 165-173
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.07.029	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 該当する

〔学会発表〕 計129件（うち招待講演 60件／うち国際学会 38件）

1. 発表者名 Y. Aoyagi, R. Kobayashi, D.L. McDowell
2. 発表標題 Simulated Microstructure Effects on Macroscopic Mechanical Properties Based on Multiscale Crystal Plasticity
3. 学会等名 The 13th International Conference on the Technology of Plasticity (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Kubo
2. 発表標題 Supercomputer “MASAMUNE-IMR” Gives Paradigm Shifts on Atomistic Wear, Corrosion, and Cracking Simulations
3. 学会等名 The 5th Symposium for The Core Research Cluster for Materials Science and Spintronics, and the 4th Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Ogata
2. 発表標題 Hydrogen effect on vacancy diffusion in metals
3. 学会等名 Euromat 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Ogata
2. 発表標題 Modeling of hydrogen accelerated vacancy diffusion in metals
3. 学会等名 THERMEC 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Aoyagi, S. Mori
2. 発表標題 Crystal Plasticity Simulation Considering Microstructures of High Entropy Alloy on Mechanical Properties
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Kubo
2. 発表標題 Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulations on Wear, Corrosion, and Cracking Mechanisms
3. 学会等名 24th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 尾方成信
2. 発表標題 プラスチックの核生成と運動の原子論的解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季(第170回)講演大会, (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 下川智嗣
2. 発表標題 金属結晶材料の格子欠陥と機械的性質に関する原子シミュレーション
3. 学会等名 第35期CAMMフォーラム本例会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 久保百司
2. 発表標題 スーパーコンピュータを活用した超大規模並列計算による材料設計のパラダイムシフト
3. 学会等名 CURIEセミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久保百司
2. 発表標題 超大規模計算によるパラダイムシフト
3. 学会等名 BIOVIA User Conference（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の特異な力学特性に関する計算科学研究
3. 学会等名 第70期 塑性工学ノマルチスケール材料力学 合同部門委員会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 都留智仁，イバン ロブゼンコ，椎原良典，魏代修，弓削是貴，青柳吉輝，下川智嗣，久保百司，尾方成信，加藤秀実，橋本直幸，上田幹人，林重成，岡弘，磯部繁人
2. 発表標題 第一原理計算によるハイエントロピー合金の諸特性の評価
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期（第169回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久保百司
2. 発表標題 スーパーコンピュータ"MASAMUNE-IMR"を活用した大規模計算科学シミュレーション
3. 学会等名 91回金属材料研究所夏期講習会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 トロピカル極限から見る統計力学の非線型性
3. 学会等名 日本物理学会2021年年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三宅遼吾, 杉江昂, 弓削是貴
2. 発表標題 合金の自由エネルギーを特徴づける特殊な原子配置の構築
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 合金の微視的構造と多体相互作用の対応：非線型性の観点から
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都留智仁, イバンロブゼンコ, 弓削是貴, 青柳吉輝, 下川智嗣, 久保百司, 尾方成信
2. 発表標題 BCCハイエントロピー合金における短距離秩序と転位構造の第一原理計算
3. 学会等名 金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 魏代修, 都留智仁, 岡本範彦, 市坪哲, 加藤秀実
2. 発表標題 Tailoring local structure of high entropy alloys to overcome the strength-ductility trade-off
3. 学会等名 金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 橋本直幸, 磯部繁人, 岡弘, 林重成, 上田幹人, 山下真一郎, 板倉充洋, 都留智仁
2. 発表標題 金属積層造形による新規低放射化ハイエントロピー合金の開発
3. 学会等名 金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木知明, 海老原健一, 都留智仁
2. 発表標題 BCC 鉄におけるへき開面と転位の射出 - 分子動力学シミュレーション -
3. 学会等名 金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 劉暢, 陳茜, 王楊, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 真空と水環境におけるFeNiCrCoMo系ハイエントロピー合金の応力割れプロセスの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会第168回講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森茂樹, 青柳吉輝
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の積層欠陥エネルギーに関する結晶塑性論的検討
3. 学会等名 第6回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 塩谷光平, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の粒界偏析が転位放出にもたらす影響
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期第167回講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 姜華, 渡邊千尋, 宮嶋陽司, 古賀紀光, 青柳吉輝, 小林正和, 三浦博己
2. 発表標題 ヘテロナノ組織オーステナイト鋼の変形機構の検討
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木慎也, 姜華, 渡邊千尋, 古賀紀光, 宮嶋陽司, 青柳吉輝, 小林正和, 三浦博己
2. 発表標題 ヘテロナノ組織二相ステンレス鋼の応力分配挙動
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tsuru
2. 発表標題 First-principles calculations of dislocation core structure in BCC-HEAs
3. 学会等名 SNA+MC2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青柳吉輝, 小林亮太, 都留智仁, 弓削是貴, 下川智嗣, 久保百司, 尾方成信
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の圧延加工組織に関する結晶塑性FEM解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年春期講演大会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青柳吉輝
2. 発表標題 微細組織情報に基づいた力学特性予測に関する結晶塑性シミュレーション
3. 学会等名 日本材料学会高温強度部門委員会講演会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久保百司
2. 発表標題 計算科学シミュレーションによるハイエントロピー合金の応力腐食割れ現象の解明と材料設計
3. 学会等名 日本鉄鋼協会・日本金属学会関西支部鉄鋼プロセス研究会・材料化学研究会令和2年度合同講演会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都留智仁, 山口正剛, 板倉充洋, 海老原健一, 清水一行, Artenis Bendo, 松田健二, 戸田裕之
2. 発表標題 高強度アルミニウム合金の水素誘起自発的破壊現象の解明：実験と計算科学からのアプローチ
3. 学会等名 軽金属学会第139回秋期大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青柳吉輝
2. 発表標題 金属微視的組織情報に基づく巨視的力学特性予測に関する結晶塑性シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会東北支部第56期秋季講演会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 尾方成信、都留智仁、下川智嗣、久保百司、青柳吉輝、弓削是貴
2. 発表標題 計算材料科学によるハイエントロピー合金の力学特性の解明
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期講演会大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 久保百司
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における応力腐食割れの反応分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青柳吉輝
2. 発表標題 マルテンサイト変態誘起塑性モデリング
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期（第167回）大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 下川智嗣
2. 発表標題 Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations
3. 学会等名 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 On-line 研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 C. Liu, Q. Chen, Y. Wang, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa, M. Kubo
2. 発表標題 Stress Corrosion Cracking Mechanism of FCC Type High-entropy Alloys Structural Materials under High Temperature Pressurized Water Environment by Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 TMS 2020 149th Annual Meeting & Exhibition (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 原子・電子論的研究に基づく金属材料の力学特性に及ぼす欠陥組織と合金化の影響評価
3. 学会等名 第4回元素戦略プロジェクト連携シンポジウム ~産学連携研究新展開~
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Yuge
2. 発表標題 Bidirectional Stability Breaking in Thermodynamic Average for Multicomponent Alloys
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Miyazaki, C. Liu, Q. Chen, M. Kubo
2. 発表標題 Reactive Molecular Dynamics Simulation of Intergranular Stress Corrosion Cracking Process of FeNiCr Based High Entropy Alloy
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. P. Campos, S. Shinzato, A. Ishii, S. Ogata
2. 発表標題 Temperature Dependent Grain Boundary Segregation in BCC-Fe A Grand Canonical Monte Carlo - Molecular Dynamics Hybrid Study
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Shiotani, T. Niyama, T. Shimokawa
2. 発表標題 Influence of Atomic Size Defference on Dislocation Emission from Grain Boundaries in High Entropy Alloys
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, K. Shiotani, T. Niyama
2. 発表標題 Deformation mechanism and mechanical properties of mixed amorphous-crystalline system through atomic simulations
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 第一原理計算による転位構造の計算：転位運動に関する特性の評価
3. 学会等名 名古屋大学第13回物質科学談話会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, K. Shiotani, T. Niyama
2. 発表標題 Dislocation emission from grain boundaries in high entropy alloys through atomic simulations
3. 学会等名 World Congress on High Entropy Alloys (HEA 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 原子・電子シミュレーションを用いた欠陥挙動に基づく力学特性の評価
3. 学会等名 日本金属学会研究会 “ 微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング ”
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 転位芯の局所自由度を有する力学理論に基づく新奇機能の創出
3. 学会等名 日本機械学会 M&M2019 材料力学カンファレンス 特別企画
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tsuru, T. Suzudo, M. Itakura, M. Wakeda, S. Ogata
2. 発表標題 A numerical description of the motion of screw dislocation around solutes in tungsten alloys
3. 学会等名 The Nineteenth International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 劉暢, 柳澤穂波, 陳茜, 王楊, 宮崎成正, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 分子動力学法を用いた腐食環境下における FCC 型ハイエントロピー合金の粒界割れメカニズムの検討
3. 学会等名 第5回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 塚田悠介, 渡邊千尋, 小林正和, 戸高義一, 三浦博己, 青柳吉輝
2. 発表標題 オーステナイト鋼におけるヘテロナノ組織形態の影響に関するFEM 解析
3. 学会等名 第5回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. P. Campos, S. Shinzato, A. Ishii, S. Ogata
2. 発表標題 A grand canonical Monte Carlo - Molecular Dynamics hybrid free energy analysis of grain boundary segregation
3. 学会等名 20th International Union of Materials Research Societies International Conference in Asia (IUMRS-ICA) 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川智嗣, 新山友暁, 塩谷光平
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の粒界特性に関する原子シミュレーション
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 小林亮太, 相樂篤志, 青柳吉輝
2. 発表標題 微細粒アルミニウムの微視組織情報に基づく巨視的降伏挙動に関する検討
3. 学会等名 日本機械学会第32回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 N. Miyazaki, C. Liu, Q. Chen, H. Yanagisawa, Y. Ootani, N. Ozawa, M. Kubo
2 . 発表標題 Reactive Molecular Dynamics Simulation of Crack Propagation Process of High Entropy Alloy under Pressurized High Temperature Water
3 . 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advance Materials and Processing (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Tsukuda, Y. Aoyagi
2 . 発表標題 Modeling of twinning-induced plasticity of high entropy alloy based on crystal plasticity
3 . 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advance Materials and Processing (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Shinzato, S. Ogata
2 . 発表標題 Atomistic study on grain boundary free energy of substitutional alloy using grand canonical Monte Carlo method
3 . 学会等名 The 12th International Workshop on Materials Behavior at the Micro- and Nano-scale (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Shimokawa and T. Niiyama
2 . 発表標題 Deformation mechanism and mechanical properties of γ system through atomic simulations
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tsuru, M. Itakura, K. Yuge, Y. Aoyagi, T. Shimokawa, M. Kubo, S. Ogata
2. 発表標題 First-principles modeling for dislocation motion of HEA alloys
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Aoyagi, D. McDowell
2. 発表標題 Multiscale crystal plasticity simulation based on fatigue indicator parameters on ultrafine-grained metals
3. 学会等名 5th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, T. Niiyama, K. Higashida
2. 発表標題 Work hardening by grain boundary transformation in multilayer nanopillars
3. 学会等名 Intergranular and interphase boundaries in materials (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Yuge
2. 発表標題 Anharmonicity in Structural Degree of Freedom: A Central Key for Bidirectional Stability in Thermodynamic Average
3. 学会等名 The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 R. Miyake, S. Ohta and K. Yuge
2 . 発表標題 Efficient Construction of Special Microscopic States for Thermodynamically Equilibrium State Based on Singular Value Decomposition
3 . 学会等名 The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Ohta and K. Yuge
2 . 発表標題 Systematic, Exact Formulation of Multivariate Moments for Configurational Geometry in Crystalline Solids
3 . 学会等名 The 6th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Shinzato, E. Kasuya, S. Ogata
2 . 発表標題 An atomistic modeling of solute segregation in substitutional alloys using database-driven Monte Carlo method
3 . 学会等名 13th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM13) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Ogata
2 . 発表標題 Atomistic prediction of temperature and loading rate dependent pop in load of nanoindentation
3 . 学会等名 13th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM13) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 劉暢, 陳茜, 王楊, 宮崎成正, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 FCC型FeNiCr系ハイエントロピー合金の応力腐食割れプロセスの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 コンピュータ化学会2019年春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 塚田悠介, 椿翔太, 黒澤瑛介, 青柳吉輝
2. 発表標題 画像処理モデリングに基づくDP 鋼マルテンサイト組織形状に関するFEM 解析
3. 学会等名 日本材料学会第68期学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 沈沢奇, J. -P. Du, 尾方成信
2. 発表標題 高エントロピー合金の自己拡散の分子動力学解析
3. 学会等名 第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 塩谷光平, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の粒界に関する原子シミュレーション
3. 学会等名 第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Aoyagi, D. McDowell
2 . 発表標題 Multiscale crystal plasticity modeling on martensitic transformation based on mixture law
3 . 学会等名 International Conference on Plasticity, Damage and Fracture (ICPDF) 2020 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 S. Ogata, S. Shinzato, Y. Sato, Takahito Ohmura
2 . 発表標題 Atomistic modeling of the temperate and loading rate dependent pop-in load in nanoindentation
3 . 学会等名 International Conference on Plasticity, Damage and Fracture (ICPDF) 2020 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 S. Ogata
2 . 発表標題 Multiscale modeling study of pop-ins in nanoindentation
3 . 学会等名 Asia Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) 2019 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 C. Liu, Q. Chen, Y. Wang, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa, M. Kubo
2 . 発表標題 Molecular Dynamics Simulation on Intergranular Cracking Mechanism of FCC Type High-Entropy Alloys Structural Materials in High-Temperature Pressurized Water Environment
3 . 学会等名 EMN Hong Kong Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Ogata
2 . 発表標題 Modeling and simulation of defect and defect behavior in high entropy alloys
3 . 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (MRS fall meeting 2019) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Aoyagi, A. Sagara, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka, H. Miura
2 . 発表標題 Multiscale simulation based on macroscopic deformation model predicted by microstructure information of ultrafine-grained metals
3 . 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM-10) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Tsuru, M. Itakura, K. Yuge, Y. Aoyagi, T. Shimokawa, M. Kubo, S. Ogata
2 . 発表標題 First-principles predictions of dislocation motion in high-entropy alloys
3 . 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM-10) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Ogata, Y. Sato, T. Ohmura and S. Shinzato
2 . 発表標題 Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent pop-in load in nanoindentation
3 . 学会等名 The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka, H. Miyoshi, A. Ishii, and S. Ogata
2. 発表標題 Ab-initio based multiscale modeling of formation kinetics of nano-precipitates in Al-Cu alloys
3. 学会等名 The 6th Korea Multi-scale Mechanics Symposium (KMSM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tsuru, T. Suzudo
2. 発表標題 First-principles calculations of the motion of screw dislocation around solutes in W alloys
3. 学会等名 6th FMTCP Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 BCC合金の転位運動に基づく変形機構と力学特性：第一原理計算と力学モデルによる解析
3. 学会等名 第10回プラストンに基づく変形現象研究会 ~BCC金属の特異な力学特性~ (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 原子・電子シミュレーションを用いた欠陥挙動に基づく力学特性
3. 学会等名 スパコンプロフェッショナルNo.27 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Ogata, T. Ohmura, Y. Sato, S. Shinzato
2. 発表標題 Modeling of pop-ins in nanoindentation
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tsuru
2. 発表標題 First-principles calculations of dislocation core structure and motion in high entropy alloys
3. 学会等名 The 11th Korea-Japan-Berkeley symposium (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 尾方成信
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の力学特性のモデリングとシミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会シンポジウム「ハイエントロピー合金の材料科学」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の微視的構造と多体相互作用の幾何学的考察
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期(第165回)講演大会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 第一原理計算による転位運動と温度に依存した変形機構の研究
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期（第165回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁・弓削是貴・青柳吉輝・下川智嗣・久保百司・尾方成信
2. 発表標題 第一原理計算によるハイエントロピー合金の転位構造と運動に関する研究
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期（第165回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川智嗣, 新山友暁, 塩谷光平
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の粒界特性に関する原子シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期（第165回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Suzudo and T. Tsuru
2. 発表標題 First Principles Modeling on Radiation Defects in W and W-based Alloys
3. 学会等名 4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山本晶太, 渡邊千尋, 門前亮一, 都留智仁, 三浦博己
2. 発表標題 多軸鍛造加工を施したCP-Tiの変形挙動の結晶粒径依存性とひずみ速度依存性
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(第164回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 熱力学的平衡状態での多元系合金の構造を特徴付ける特殊な微視的状态
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(第164回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 附田拓也, 青柳吉輝
2. 発表標題 混合則を用いた双晶誘起塑性モデリングおよび結晶塑性シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(第164回)講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Yanagisawa, Q. Chen, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo
2. 発表標題 The Effect of the Al ₂ O ₃ Film on Stress Corrosion Cracking of the Ni-Al Alloy in High Temperature and Pressure Water Analyzed by Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 43rd International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 園田郁未, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 原子シミュレーションによる結晶と非晶質の混在組織における力学特性解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 都留智仁, 山口正剛, 板倉充洋
2. 発表標題 Ti合金の変形モード変化に対する合金元素の影響: 第一原理計算
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大田将之, 弓削是貴
2. 発表標題 配位空間上の幾何学と平衡状態の巨視的性質
3. 学会等名 第28回日本MRS年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 塩谷光平, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 ハイエントロピー合金化に対する構成元素の原子半径比の影響: 2体間相互作用の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1 . 発表者名 N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo
2 . 発表標題 Large-Scale Reactive Molecular Dynamics Analysis for the Intergranular Stress Corrosion Cracking Mechanism on Titanium under Water Environment
3 . 学会等名 Summit of Materials Science 2018
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Tsuru, M. Itakura, M. Yamaguch, T. Suzudo, M. Wakeda, S. Ogata, D. C. Chrzan
2 . 発表標題 Effect of solutes on dislocation motion in dilute hcp and bcc alloys
3 . 学会等名 The 9th international conference on Multiscale Materials Modeling
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 A. Sagara and Y. Aoyagi
2 . 発表標題 Development of a Multiscale Simulation System Based on Microstructure of Fine-grained Aluminum
3 . 学会等名 The 9th international conference on Multiscale Materials Modeling
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Q. Chen, J. Xu, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo,
2 . 発表標題 Molecular Dynamics Simulation on Intergranular Cracking Mechanism of Iron Material in High Temperature Pressurized Water Environment
3 . 学会等名 The 9th international conference on Multiscale Materials Modeling
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Wang, S. Ogata
2. 発表標題 Creep mechanisms of nanocrystalline metals at atomic-scale
3. 学会等名 International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 附田拓也, 河原木雄介, 岡村一男, 青柳吉輝
2. 発表標題 結晶塑性論に基づくマルテンサイト変態誘起塑性モデルの構築
3. 学会等名 第4回材料WEEK 材料シンポジウム ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 都留智仁, 鈴木知明, 譚田真人, 尾方成信
2. 発表標題 BCC合金の機械特性に対する合金元素の影響
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演(第163回)大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 宮崎成正, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 1千万原子系大規模分子動力学解析による多結晶チタンの粒界割れメカニズムの検討
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演(第163回)大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 奥野泰希, 都留智仁, 今泉充
2. 発表標題 InP系化合物半導体中のはじき出し閾値エネルギーの材料依存性
3. 学会等名 応用物理学会2018年第79回
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 陳茜, 柳澤穂波, 宮崎成正, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 計算科学に基づく高温・高圧水環境下における鉄鋼材料の粒界破壊メカニズムの検討
3. 学会等名 2018年度精密工学会秋季大会学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 柳澤穂波, 陳茜, 宮崎成正, 大谷優介, 尾澤伸樹, 久保百司
2. 発表標題 高温高圧下のNi/Ni3Al整合界面における応力腐食割れメカニズムの分子動力学解析
3. 学会等名 2018年度精密工学会秋季大会学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 An Accelerated Molecular Dynamics Study of Yield Stress of Ultrafine-grained Metals
3. 学会等名 The 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM13) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 園田郁未, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 二原子混合固体材料における組織・強度の原子間ポテンシャル依存性
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原一輝, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 規則・不規則混合固体材料の強さと変形機構の検討
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Shimokawa
2. 発表標題 Influence of Interface-mediated plasticity on mechanical properties of nanostructured materials
3. 学会等名 7th ESISM Workshop (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Tsuru
2. 発表標題 Effect of solutes on dislocation core structure and motion
3. 学会等名 7th ESISM Workshop (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Aoyagi, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka and H. Miura
2. 発表標題 Multiscale Crystal Plasticity Modeling on Twinning of Hetero-Nanostructured Stainless Steels
3. 学会等名 International Symposium on Plasticity, Damage, and Fracture 2019, (ICPDF 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 HYDROGEN AND DISLOCATION ASSISTED GRAIN BOUNDARY CRACK INITIATION ~ A MOLECULAR DYNAMICS STUDY ~
3. 学会等名 International Symposium on Plasticity, Damage, and Fracture 2019, (ICPDF 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Q. Chen, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo
2. 発表標題 Failure Mechanisms of Steels under High Temperature Pressurized Water Environment - A Reactive Molecular Dynamics Study
3. 学会等名 Lectures at the State Key Laboratory for Manufacturing System Engineering, School of Mechanical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata and Wei Wang
2. 発表標題 Universal one to one relation between critical resolved shear stress and mean square atomic displacement in random high entropy alloys
3. 学会等名 2018 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting & Exhibit (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Tsuru, T. Suzudo, M. Itakura, M. Yamaguch, M. Wakeda, S. Ogata, D. C. Chrzan
2 . 発表標題 DFT-based predictions of the effect of solutes on dislocation motion in bcc and hcp alloys
3 . 学会等名 International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity (招待講演)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 J. Du, S. Ogata
2 . 発表標題 Vacancy diffusion in metals in hydrogen environment
3 . 学会等名 ACCMS-TM2018 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Q. Chen, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo
2 . 発表標題 Reactive Molecular Dynamics Simulation on Stress Corrosion Cracking of Steel under High Temperature Pressurized Water Environment
3 . 学会等名 First Symposium on Multi-Scale and Multi-Physics Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Shigenobu Ogata, Takahito Ohmura, and Yuji Sato
2 . 発表標題 Atomistic prediction of temperature and loading-rate dependent critical indentation load of the onset of homogeneous dislocation nucleation
3 . 学会等名 The 6th International Indentation Workshop (招待講演)
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 Jun-Ping Du, Wen Tong Geng, Kazuto Arakawa, Shigenobu Ogata
2. 発表標題 First-principles prediction of Hydrogen-promoted vacancy diffusion in metals
3. 学会等名 The 11th International Workshop on Materials Behavior at the Micro- and Nano-Scale (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下川智嗣, 新山友暁
2. 発表標題 結晶・非晶質混在構造の変形と強度に関する原子シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(第164回)講演大会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁, 山口正剛, 板倉充洋, D.C. Chrzan
2. 発表標題 六方晶合金の特異なすべり特性と合金元素の影響に関する研究
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季(第164回)講演大会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 都留智仁
2. 発表標題 欠陥挙動に基づく構造材料の力学特性と合金開発 ~原子・電子シミュレーション~
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 材料の組織と特性部会 第二回研究会フォーラム(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 尾方成信
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の物性の原子シミュレーション
3. 学会等名 日本学術振興会材料の微細組織と機能性第133委員会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 固体材料の非弾性変形における非平衡臨界挙動
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期（第163回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 尾方成信, Wei Wang
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の臨界分解せん断応力の起源についての原子論的考察
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期（第163回）講演大会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 弓削是貴
2. 発表標題 配位空間上の幾何学から再構築する統計力学と材料科学への応用
3. 学会等名 第28回格子欠陥フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下川智嗣
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるナノ組織材料の変形・力学解析
3. 学会等名 日本機械学会第8回材料力学における異分野融合に関する研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 乾 晴行 編、尾方成信、都留智仁、弓削是貴 他	4. 発行年 2020年
2. 出版社 内田老鶴圃	5. 総ページ数 196
3. 書名 ハイエントロピー合金: カクテル効果が生み出す多彩な新物性	

1. 著者名 Shigenobu Ogata	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer, Cham	5. 総ページ数 17
3. 書名 Handbook of Materials Modeling	

〔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	都留 智仁 (Tsuru Tomohito) (80455295)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究主幹 (82110)	

6. 研究組織（つづき）

	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	下川 智嗣 (Shimokawa Tomotsugu) (40361977)	金沢大学・機械工学系・教授 (13301)	
研究分担者	久保 百司 (Kubo Monoji) (90241538)	東北大学・金属材料研究所・教授 (11301)	
研究分担者	青柳 吉輝 (Aoyagi Yoshiteru) (70433737)	東北大学・工学研究科・准教授 (11301)	
研究分担者	弓削 是貴 (Yuge Koretaka) (70512862)	京都大学・工学研究科・准教授 (14301)	

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