

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：13901

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：18H05454

研究課題名（和文）計算熱力学と計算組織学の融合によるハイエントロピー合金設計の加速

研究課題名（英文）Materials design of high-entropy alloys accelerated by synergistic combination of computational thermodynamics and simulation of phase transformations

研究代表者

小山 敏幸 (Koyama, Toshiyuki)

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：80225599

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 129,000,000円

研究成果の概要（和文）：ハイエントロピー合金(HEAs)不規則相が、巨視的には理想溶体に近い点をCALPHAD法体系から論理的に解明し、またクラスター展開法とモンテカルロ法から、固溶体内に規則構造が関与する相平衡が微視的に存在し得ることを提案した。機械学習を第一原理計算に援用し、優れた材料特性を発現する合金組成の探索手法を開発した。Cantor合金内の各種3元系を調査し、相領域を中心に実験状態図を決定するとともに、多成分系粒界偏析の計算モジュールを開発した。"遅い拡散"がHE効果で生じ得ない点を多成分系拡散理論に基づき解明し、また組織や拡散対情報を用いた逆問題式材料パラメータ推定法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

学術的意義は、HEA不規則固溶体の熱力学的安定性と拡散現象の理解が大きく深化した点である。典型的なHEAであるCantor合金の実験状態図と拡散情報が精査された点も大きい。社会的意義としては以下を開発した（本研究は、社会還元として個別材料の開発ではなく、広くHEA開発に活用できる手法開発に重点を置いている）。機械学習、第一原理電子状態図計算、およびモンテカルロ法の連携から、HEA固溶体の安定性や平均原子変位を解析する手法を開発した。多成分系粒界偏析の系統的な計算システムを作成・公開した。フェーズフィールド法と拡散実験データの連携から、各種材料パラメータを逆問題式に推定する手法を構築した。

研究成果の概要（英文）：It was logically elucidated from the CALPHAD method that the disordered state of HEAs is macroscopically close to an ideal solution. From the cluster expansion method and Monte Carlo simulations, we proposed that phase equilibria involving atomistic ordered structures can exist microscopically within the solid solution. By applying machine learning to first-principles calculations, we developed a method of searching for alloy compositions that exhibit superior material properties. The ternary alloy systems within Cantor alloy were investigated, and we determined the experimental phase diagram mainly for the β -phase region. A module to calculate the grain boundary segregation in multicomponent alloys was developed. It was clarified based on the multicomponent diffusion theory that the sluggish diffusion cannot be explained by the high-entropy effect. We proposed a methodology for estimating material parameters from microstructural information based on the inverse problem methods.

研究分野：材料組織学

キーワード：状態図 拡散 機械学習 CALPHAD法 フェーズフィールド法 第一原理計算

1. 研究開始当初の背景

ハイエントロピー合金(HEAs)は、特定の主要元素を持たない多成分高濃度合金で、近年、優れた単相特性の発現が見出され、さらに本分野が合金学の基盤的要素(固溶体強度の材料科学の刷新など)を含む学術領域であったことから、世界的に注目された。通常、合金学において、平衡状態図および拡散解析は材料開発の羅針盤的役割を担うが、研究開始当初、多成分高組成合金の状態図および拡散情報の欠如・不正確さが問題となっており、これを打開する方策として、第一原理電子状態計算を活用した理論状態図解析や実験的なハイスループット解析などの活用も世界的に同時に議論され始めた。わが国においては、当時 HEAs は、単相を対象とした特殊な材料といった認識であり、HEAs を対象とした状態図や拡散の本格的な研究は始まっていなかった。しかし HEAs の分野は、次世代の合金開発の基礎・基盤を広範囲にカバーする領域を有するため、早急に整備すべき分野であるとの認識が高まり、本課題がスタートした。

2. 研究の目的

本研究における HEAs 開発を推進するための学術課題は、「多成分系状態図全組成域における高精度・高効率な状態図アセスメントの実現」および「複雑な材料・プロセスパラメータ空間での特性最適化の加速」であり、達成目標を以下の3点とした。(i) 多成分高濃度合金固溶体に対する計算熱力学モデルの高度化とその熱力学データベースの整備、(ii) フェーズフィールド(PF)法とデータ同化を活用した熱力学パラメータおよび拡散パラメータのアセスメント手法の開発(Sluggish diffusionの本質解明も含む)、および(iii) 機械学習による HEAs 開発の効率化。

以上から、本研究の最終目的を、「計算熱力学、計算組織学、および情報材料学を相互に連携・融合させることにより、HEAs 状態図の高精度・高効率アセスメントを実現するとともに、HEAs 設計を加速させる新たな方法論を構築すること」とした。

3. 研究の方法

上記の課題を解決するために必要なスキルとして、第一原理電子状態計算、モンテカルロ解析、計算熱力学(CALPHAD法)、計算組織学(PF法)、および機械学習を想定するとともに、計算だけでなく実験からもアプローチできることを条件に、当該分野において最先端ノウハウを有する専門グループを構成した。ここで、上記3つの目標を達成するための具体的な手法は、以下のようにまとめられる。HEAsの相安定性に関しては、第一原理電子状態計算、CALPHAD法、およびモンテカルロ法をベースに、実験と計算の双方の視点から検討を進めた。拡散パラメータのアセスメントについては、CALPHAD法と連携した相互拡散理論体系、およびPF法と機械学習に基づく解析を実施した。機械学習による HEAs 開発の効率化に関しては、第一原理電子状態計算と機械学習の融合、また状態図のギブスエネルギーデータと機械学習手法の援用により、開発を加速する手法を考案した。

4. 研究成果

上記の「研究目的」の(i)~(iii)に対する成果は、以下のようにまとめられる。

(1) HEA 固溶体のギブスエネルギーを記述する計算熱力学モデルについて

図1は Mo-Nb-Ta-V-W 5元系のうち、3元系で固溶体が発現することが実験的に明らかにされている Mo-Nb-W 3元系 BCC 構造の自由エネルギー、生成エンタルピー、混合エントロピーの計算値を、MoNb-W、MoW-Nb、NbW-Mo の断面で示した例で(計算温度は 1000K)、緑線がエンタルピー、オレンジ色が配置エントロピーを $-TS$ で示したものの、青はギブスエネルギーである。各断面のエンタルピーはそれ程大きくはなく、相互作用は概ねゼロとみなせる。一方、エントロピーは完全不規則状態のそれにほぼ等しいことから、この合金系は理想溶体に近い。この理想溶体的挙動は4元系(Mo-Nb-Ta-V系など)でも同様であった。以上から、HEAsの多成分高濃度合金の不規則固溶体は基本的に理想溶体に近く、対応する計算熱力学モデルは、通常の広義の正則溶体近似にて十分であることが結論された。

上記結果は個別の解析例であるが、等組成の HEAs におけるギブスエネルギーの理論式から、成分数が増加するにつれて理想溶体に近づ

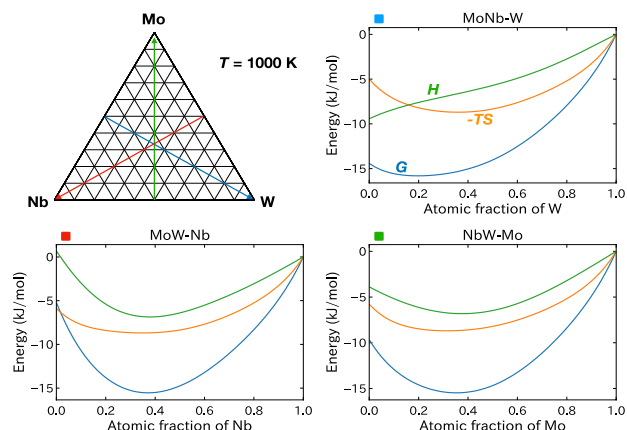


図1 Mo-Nb-W 3元系 BCC 構造の熱力学的性質

くことを論理的に証明した。さらに正則溶液モデルおよび副格子モデルを用い、相分離または規則化傾向を有する多元系合金における固溶体の相安定性を検討した結果、等原子組成付近で、単一の固溶体相が安定化され、かつその周辺で多彩な規則構造（副格子濃度で、種々分類できる規則構造）が出現することを見出した。^{①②③}

(2) パラメータ法、クラスター展開法、モンテカルロ計算に基づく HEAs の相安定性評価

種々の HEAs における熱力学的安定性を俯瞰・確認するため、固溶体安定度を示すパラメータ Ω と原子サイズ差に基づくミスフィット因子 δ の関係を図 2 ①に示す（バルク金属ガラス (BMG) 系の計算値も含む）。次にクラスター展開法を改良した平均原子変位量 (MSAD) の評価手法を考案し、エントロピー変化量 ΔS の計算結果と共に Cantor 合金を構成する 3 元系の計算結果を図 2 ②に示す。1000K 以下の低温領域では ΔS の減少と MSAD の減少の傾向が一致し（これは $L1_0$ のような規則構造の発達に伴うひずみの減少に対応すると考えられる）、一方 1000K 以上の高温領域では MSAD はほぼ一定値で、かつこの領域の ΔS は小さく ΔS と MSAD に相関はない。以上から、低温では規則化傾向を表す ΔS が強度に対して支配的であり、高温では MSAD が一定の値を保持するので、これによる局所ひずみが強度を担っていると推察された。また図 2 ③は Ni33% の断面における Co-Cr-Ni 3 元系平衡状態図に FCC 基の準安定相境界の計算値（緑線）を重ねた結果ある。黄色の領域で Co_3Cr-L1_2 構造と $CoCr-L1_0$ 構造が FCC 固溶体内で安定相として生成している。このように HEAs の固溶体領域の背後には、準安定規則構造や二相分離による複雑な相境界が広がっており、熱力学的に安定相として出現し得ることが示された。^①

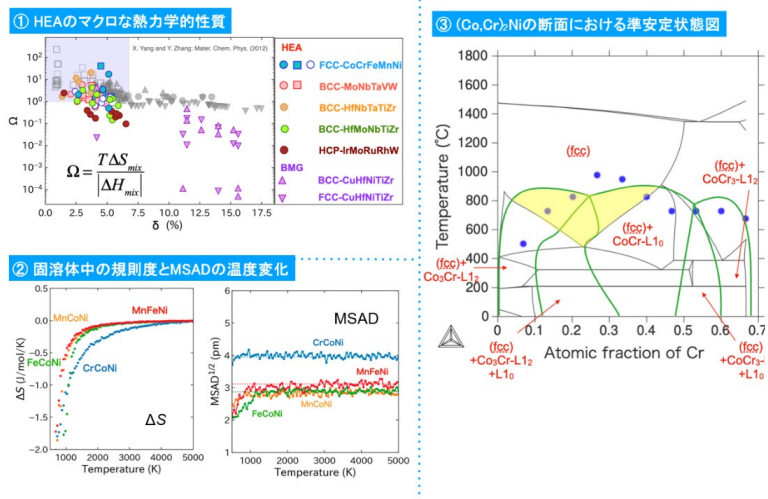


図2 パラメータ法、クラスター展開法、モンテカルロ計算に基づく HEAs の相安定性評価

(3) 第一原理計算と機械学習(ML)を組み合わせた固溶体全組成域における有限温度安定性予測

本解析では、限られた数の単純な化学量論組成での電子構造解析と有限温度での自由エネルギーデータを用いて ECNet (Element Convolution Neutral Network) のデータモデルを構築し、3 元系の全組成域に対する FCC 固溶体の安定性を系統的に調査した。例として図 3 は(a)Fe-Co-Mn 系と (b)Fe-Co-Pd 系の有限温度 ($T=0K, 500K, 1000K$) の自由エネルギー（温度に関して配置エントロピーの寄与のみを考慮）の予測結果である。Fe-Co-Mn は Fe-Co サイド以外では広い組成域で FCC 固溶体が不安定であるのに対し、Fe-Co-Pd では、Pd 元素の FCC 構造安定効果により Pd-rich コーナーにおいて FCC 固溶体の存在可能性が示された。さらに有限温度 $T=500K$ および $1000K$ の自由エネルギー分布から配置エントロピーによる安定化効果も確認された。^④

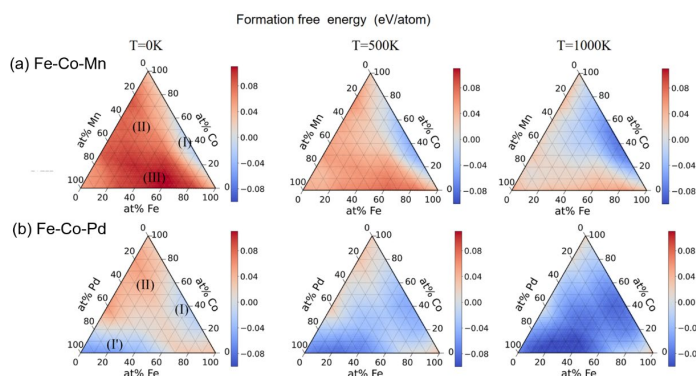


図3 ML を援用した三元系全組成域に対する FCC 固溶体形成自由エネルギーの予測結果 (有限温度: $T=0K, 500K, 1000K$)。

(4) 第一原理計算と機械学習(ML)を組み合わせた高い MSAD を有する固溶体探索

等原子組成系と非等原子組成系: $A_x(BCDE)_{1-x}$ ($x=0.2, 0.3, 0.4$) の DFT 計算データに基づき、ECNet の ML モデル、および 5 元系の全てのサブシステムの DFT データを利用した転移学習とを組み合わせて、5 種類の 5 元系に対する広い組成域 ($x=0\sim 0.4$) における平均原子変位量 (RMSD) と形成エネルギーの予測を行った。

図 4 (a) と (b) は RMSD と形成エネルギーの計算結果で、4 個の丸印は RMSD がピーク値を取

り、かつ形成エネルギーが比較的小さい正の値となる組成である。例えば $\text{Pd}_x(\text{FeCoNiCr})_{1-x}$ 系 (紫の線) に注目すると、 $x=0.2$ が高い RMSD 値を持つ等原子組成系に対応する。ここで重要な点は、より高い RMSD 値を示す組成として、 $x=0.32$ が見出された点である。さらにこの組成は、parameter free 理論で算出された降伏強度のピーク位置の組成とも対応していることも確認した。本解析では、第一原理電位状態計算と機械学習を組み合わせることにより、高い固溶強化を示す HEA 組成を提案する新手法を構築した。また構築したシステムを GitHub にて公開した (URL: <https://github.com/xinming365/ECNet>)。④

(5) Cantor 合金サブシステムの三成分系状態図の実験的決定

HEA 合金状態図の実験的検証に関しては、Cantor 合金系を構成する複数の 3 成分系の実験を進めた。代表例として Co-Cr-Mn 三元系の結果を図 5 に示す。まず $700^\circ\text{C} \sim 1200^\circ\text{C}$ において、 σ 相が広く安定相として存在すること、および $\alpha\text{Mn} + \beta\text{Mn} + \sigma$ の 3 相領域が存在することを確認した。薄赤線は SSOL5 データベース (SGTE Solutions データベース, Ver. 5) に基づく計算結果で、従来の熱力学データベースでは、実験を再現できないことがわかる。すなわち Cantor 合金は HEA 分野では最も研究されている合金系であるが、サブシステムの三成分系でさえ、充分にアセスメントできていないことが示された。また本研究では、Co-Cr-Mn 三元系と同様に、Fe-Cr-Mn 三元系においても、 900°C と 700°C にて σ 相が広く単相領域を持つことを確認するとともに、 σ 相が関与する 3 相共存領域を全て決定した。また Cr-Mn-Ni 三元系では、BCC 相 + FCC 相もしくは BCC 相 + 液相の 2 相領域が、三元系内に広く存在することを確認した。⑤⑥

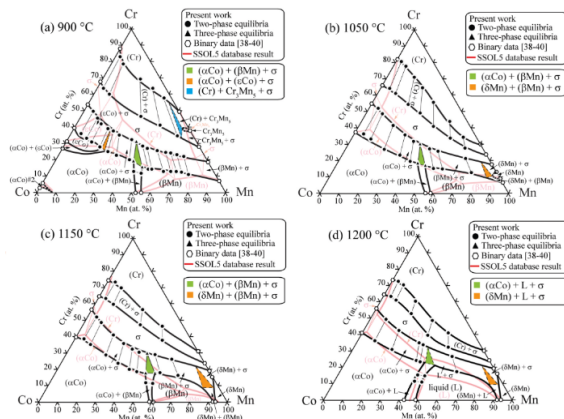


図 5 Co-Cr-Mn 三元系の等温断面図: (a) 900°C , (b) 1050°C , (c) 1150°C , および (d) 1200°C

(6) 多成分系における粒界偏析計算モジュールの作成

多成分系を対象とした粒界相モデルを汎用化し、粒界偏析を計算するモジュールを作成して、システムを GitHub (URL: <https://github.com/Y-Matsuoka-Material/GBseg-TCPython>) にて公開した。図 6(a) は、 γ 単相を仮定した場合における粒界偏析の温度依存性で、Ni と Mn は粒界に偏析し、Ni は温度低下に伴いわずかに増加する。図 6(b) は、 γ 母相が各温度で他の共存相と平衡状態にある場合における粒界偏析の温度依存性である。1200 K 以下では、粒界における Ni 濃度は温度の低下とともに増加し、Cr 濃度は温度の低下とともに減少する。これは低温で σ 相が析出し、 σ 相での Cr の濃縮と Ni の枯渇によるものと考えられる。またこれらの計算結果は、本合金の既存の実験データを定量的に再現する点も確認した。⑦

(7) Sluggish diffusion(SD)の可能性に関する理論的検討

本解析では、CALPHAD 法と連携した拡散理論体系から、SD が普遍的に導き得るかを検証した。まず理想溶体近似の混合のギブスエネルギーを用いた理論解から、配置エントロピー項が SD に寄与する状況は理論的に導かれないことを証明した。次に、易動度パラメータ内の相互作用項について、典型的な HEAs として等組成合金の単相を想定すると、相互作用項は、成分数の増加にともないゼロに

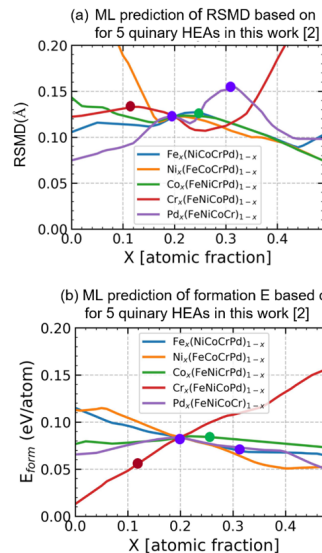


図 4 HEAs の平均原子変位量 (RMSD) と力学特性の相関に関する ML 予測と計算の比較。

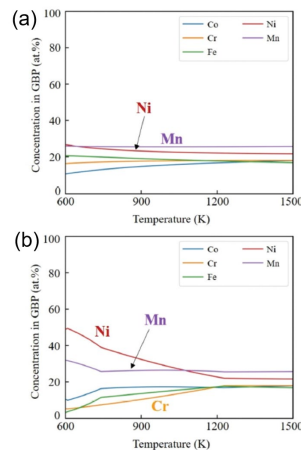


図 6 Cantor 合金における粒界偏析の計算結果

漸近することを理論的に明らかにした。図7は、Cantor 合金の成分から構成される各種合金系に対し、この挙動を具体的に計算した結果である。以上から、多成分および高組成が原因で、トレーサー拡散係数に SD が生じることは原理的に導かれないことを理論的に立証した。もちろん、特定の元素が相互作用項に大きく寄与し、その結果、拡散が遅くなることは十分に起こり得るが、これは、その元素固有の影響であり、HEAs ではない通常の低合金にも生じる現象である。また Cantor 合金における空孔濃度を熱力学に求め、Cantor 合金を構成する純元素と同程度であることを確認し、SD と空孔濃度は無関係である点も明らかにした。^{②③}

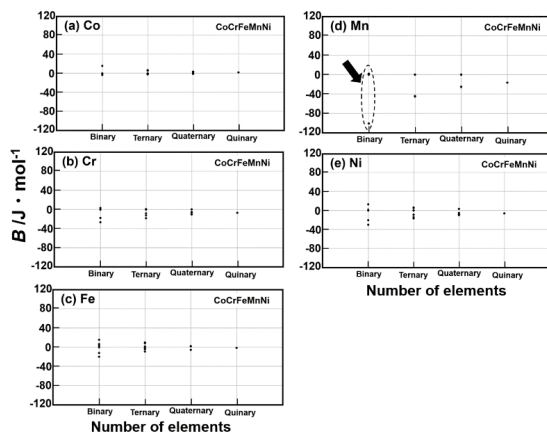


図7 Cantor 合金系における、易動度パラメータ内の相互作用項の成分数増加にもなう変化

(8) 相互拡散係数の実験的決定およびデータ解析における機械学習手法の開発

多成分系の拡散解析に関しては、Fe-Co-Mn 系、Cr-Mn-Co 系、Fe-Cr-Mn 系、Ni-Mn-Cr 系、および Co-Cr-Mn 系において、拡散対にて相互拡散係数の測定を行うとともに、Fe-Co-Mn 系と Cr-Mn-Co 系については、熱力学的な解析も含め易動度パラメータを決定した。図8は Fe-Co-Mn 系の解析例で（記号は実験データ、実線が計算結果）、状態図上の拡散経路を再現するパラメータの算出に成功した。

また機械学習手法の本分野への展開として、拡散対濃度プロファイルを用い、逆問題式に材料パラメータを推定する手法を整備した。計算の効率性ならびに汎用性向上のため、今回、機械学習のツールである PyTorch と自動微分またはネルダーミード法を活用したモジュールを構築した。^⑨

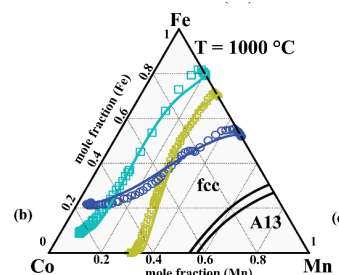


図8 拡散対プロファイルの状態図上における経路

(9) 相分離組織とデータ同化手法を活用した材料パラメータの推定

データ同化法の一つであるアジョイント法を用いて、3元系スピノーダル分解の組織変化データ（濃度場の時系列データ）をフェーズフィールド(PF)モデルに同化し、6つの材料パラメータ（溶体相のギブスエネルギーパラメータ、易動度パラメータ、および濃度勾配エネルギーの3種類）を同時推定する新手法を構築した。図9(a)は、反復数 k の増加に伴う損失関数の減少過程で、 $k=30$ で、推定対象の全パラメータが真値と一致した。図9(b)は、図9(a)の矢印位置におけるスピノーダル分解組織形成の計算例で、材料パラメータが真値に近づくにつれて、スピノーダル分解挙動も疑似実験データの組織変化に近づいていく過程を示している。また濃度場に測定ノイズを付加して推定を行うことにより、測定ノイズの大きさや測定データの取得の時間間隔がパラメータ推定値の不確実性に及ぼす影響を定量的に明らかにした。^⑩

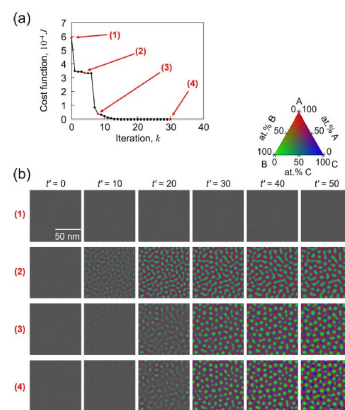


図9 材料パラメータ最適化に伴う損失関数と組織形態の変化

〈引用文献〉

- ① 「ハイエントロピー合金」, 乾 晴行 編著, 内田老鶴圃, (2020).
- ② T.Koyama, Y.Tsukada and T.Abe, J. Phase Equilib. Diffus., **43** (2022), 68-77.
- ③ T.Abe, K.Han, Y.Goto, I.Ohnuma, and T.Koyama, Mater. Trans., **64** (2023) 877-884.
- ④ X. Wang, Nguyen-Dung Tran, Ying Chen, *et. al.*, npj Comp. Mater., **8** (2022) 253.
- ⑤ H.G.Li, J.J.Ruan, N.Ueshima, K.Oikawa, J. Alloys and Comp., **867** (2021), 159024.
- ⑥ H.G.Li, J.J.Ruan, N.Ueshima, K.Oikawa, Intermetallics, **127** (2020), 106994.
- ⑦ M. Funamoto, Y. Matsuoka, Y. Tsukada, and T. Koyama, Sci. Technol. Adv. Mater. Meth., **2** (2022) 322-333.
- ⑧ T.Abe, Mater. Trans., **62** (2021), 711-718.
- ⑨ S.P.Pendem, N.Ueshima, K.Oikawa, Y.Tsukada, and T.Koyama, J. Mater. Sci., **57** (2022) , 15999-16015.
- ⑩ Y. Matsuura, Y. Tsukada, T. Koyama, Phys. Rev. Mater., **5** (2021), 113801.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計96件（うち査読付論文 88件 / うち国際共著 19件 / うちオープンアクセス 19件）

1. 著者名 Abe Taichi, Han Kwangsik, Goto Yumi, Ohnuma Ikuo, Koyama Toshiyuki	4. 巻 64
2. 論文標題 Stabilization of Equiatomic Solutions Due to High-Entropy Effect	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 877 ~ 884
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2022167	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 Tran Nguyen-Dung, Davey Theresa, Chen Ying	4. 巻 133
2. 論文標題 DFT calculations of structural, magnetic, and stability of FeNiCo-based and FeNiCr-based quaternary alloys	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 045101 ~ 045101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0134915	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 Furuhara Tadashi, Zhang Yongjie, Sato Mitsutaka, Miyamoto Goro, Enoki Masanori, Ohtani Hiroshi, Uesugi Tokuteru, Numakura Hiroshi	4. 巻 223
2. 論文標題 Sublattice alloy design of high-strength steels: Application of clustering and nanoscale precipitation of interstitial and substitutional solutes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 115063 ~ 115063
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2022.115063	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 Funamoto Masataka, Matsuoka Yusuke, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 2
2. 論文標題 Prediction of grain boundary chemistry in multicomponent alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 322 ~ 333
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2112915	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 Xinming, Tran Nguyen-Dung, Zeng Shuming, Hou Cong, Chen Ying, Ni Jun	4. 巻 8
2. 論文標題 Element-wise representations with ECNet for material property prediction and applications in high-entropy alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 253(10pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-022-00945-x	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 Pendem Sri Pragna, Ueshima Nobufumi, Oikawa Katsunari, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 57
2. 論文標題 Thermodynamic and atomic mobility assessment of the Co-Fe-Mn system	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 15999 ~ 16015
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10853-022-07612-y	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 Oikawa Katsunari, Ueshima Nobufumi	4. 巻 43
2. 論文標題 Experimental Investigation and Thermodynamic Assessment of Ni-B and Ni-B-C Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 814 ~ 826
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-022-00995-0	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 Han K., Saito M., Xia J., Ohnuma I., Kainuma R.	4. 巻 919
2. 論文標題 Experimental determination of phase diagram involving silicides in the Fe-Si binary system	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 165810 ~ 165810
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.165810	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 Tokunaga Tatsuya, Motomura Yuta, Era Hidenori, Tsuchiyama Toshihiro, Shobu Kazuhisa, Hasebe Mitsuhiro, Ohtani Hiroshi	4. 巻 109
2. 論文標題 Effect of Alloying Elements on Grain Boundary Segregation of Boron and Carbon in α -Iron	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Tetsu-to-Hagane	6. 最初と最後の頁 158 ~ 166
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2022-081	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, Minamoto Satoshi, Ohnuma Ikuo, Abe Taichi, Ohtani Hiroshi	4. 巻 63
2. 論文標題 Current Status and Future Scope of Phase Diagram Studies	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 407 ~ 418
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2022-408	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 Wang Lei, Chen Ying, Miura Hideo, Suzuki Ken, Wang Cong	4. 巻 34
2. 論文標題 Penta-graphene and phagraphene: thermal expansion, linear compressibility, and Poisson's ratio	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 505301 ~ 505301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac9c3e	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 Wang Lei, Chen Ying, Ni Jun, Ye Feng, Wang Cong	4. 巻 61
2. 論文標題 Anharmonic Interaction in Negative Thermal Expansion Material CaTiF_6	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 17378 ~ 17386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c03263	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 Wang Lei, Chen Ying, Miura Hideo, Suzuki Ken, Wang Cong	4. 巻 12
2. 論文標題 Tunable uniaxial, area, and volume negative thermal expansion in quartz-like and diamond-like metal-organic frameworks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 21770 ~ 21779
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2ra03292a	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 Davey Theresa, Chen Ying	4. 巻 4
2. 論文標題 Vacancy ordering in substoichiometric zirconium carbide: A review	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Ceramic Engineering & Science	6. 最初と最後の頁 134 ~ 157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ces2.10126	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 Jinkai, Li Qiyang, Lu Zhanpeng, Wang Hao, Lu Xiao-Gang, Chen Ying	4. 巻 197
2. 論文標題 The effect of impurities on stacking fault energy and dislocation properties in γ -TiAl	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Vacuum	6. 最初と最後の頁 110866 ~ 110866
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.vacuum.2021.110866	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 Ruan Jingjing, Chen Yuyuan, Kobayashi Kosei, Ueshima Nobufumi, Oikawa Katsunari	4. 巻 15
2. 論文標題 Investigations on the Phase Transformations, Equilibria and Athermal β in Ni-Ga-Cr Ternary System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials	6. 最初と最後の頁 7617 ~ 7617
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ma15217617	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 Matsuoka Yusuke, Bian Mingzhe, Huang Xinsheng, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki, Chino Yasumasa	4. 巻 906
2. 論文標題 Simulation-aided analysis on mechanical properties of dilute Mg-Zn-Ca alloy sheets	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 164285 ~ 164285
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.164285	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 Ishiguro Yuya, Huang Xinsheng, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki, Chino Yasumasa	4. 巻 29
2. 論文標題 Effect of bending and tension deformation on the texture evolution and stretch formability of Mg-Zn-RE-Zr alloy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials	6. 最初と最後の頁 1334 ~ 1342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s12613-021-2398-8	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 Bian Mingzhe, Nakatsugawa Isao, Matsuoka Yusuke, Huang Xinsheng, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki, Chino Yasumasa	4. 巻 241
2. 論文標題 Improving the mechanical and corrosion properties of pure magnesium by parts-per-million-level alloying	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118393 ~ 118393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2022.118393	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 Tamura Ryo, Deffrennes Guillaume, Han Kwangsik, Abe Taichi, Morito Haruhiko, Nakamura Yasuyuki, Naito Masanobu, Katsube Ryoji, Nose Yoshitaro, Terayama Kei	4. 巻 2
2. 論文標題 Machine-Learning-Based phase diagram construction for high-throughput batch experiments	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 153 ~ 161
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2076548	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 Koyama Toshiyuki, Tsukada Yuhki, Abe Taichi	4. 巻 43
2. 論文標題 Simple Approach for Evaluating the Possibility of Sluggish Diffusion in High-Entropy Alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 68 ~ 77
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-022-00938-9	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 Wang Xinming, Zhao Yinchang, Zeng Shuming, Wang Zhuchi, Chen Ying, Ni Jun	4. 巻 105
2. 論文標題 Cubic halide perovskites as potential low thermal conductivity materials: A combined approach of machine learning and first-principles calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 14310
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.014310	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 Davey Theresa, Chen Ying	4. 巻 12
2. 論文標題 The effect of oxygen impurities on the stability and structural properties of vacancy-ordered and -disordered ZrCx	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 3198 ~ 3215
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1RA07768F	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 Terayama Kei, Han Kwangsik, Katsube Ryoji, Ohnuma Ikuo, Abe Taichi, Nose Yoshitaro, Tamura Ryo	4. 巻 208
2. 論文標題 Acceleration of phase diagram construction by machine learning incorporating Gibbs' phase rule	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114335 ~ 114335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114335	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 Tran Nguyen-Dung, Saengdeejing Arkapol, Suzuki Ken, Miura Hideo, Chen Ying	4. 巻 42
2. 論文標題 Stability and Thermodynamics Properties of CrFeNiCoMn/Pd High Entropy Alloys from First Principles	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 606 ~ 616
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-021-00900-1	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 Saengdeejing Arkapol, Chen Ying	4. 巻 42
2. 論文標題 Improving Thermodynamic Stability of SmFe12-Type Permanent Magnets from High Entropy Effect	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 592 ~ 605
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-021-00894-w	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 Davey Theresa, Suzuki Ken, Miura Hideo, Chen Ying	4. 巻 11
2. 論文標題 Stability and structural properties of vacancy-ordered and -disordered ZrCx	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 32573 ~ 32589
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1RA06362F	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 Abe Taichi, Morishita Masao, Chen Ying, Saengdeejing Arkapol, Hashimoto Kiyoshi, Kobayashi Yoshinao, Ohnuma Ikuo, Koyama Toshiyuki, Hirose Satoshi	4. 巻 22
2. 論文標題 Development of a prototype thermodynamic database for Nd-Fe-B permanent magnets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 557 ~ 570
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2021.1936627	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 Jinkai, Cui Xin, Huang Jianxin, Wang Hao, Lu Zhanpeng, He Yanlin, Chen Ying	4. 巻 23
2. 論文標題 The bonding variation of γ -TiAl during deformation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3905 ~ 3914
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp06395a	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 Enoki Masanori, Takahashi Kota, Mitomi Soei, Ohtani Hiroshi	4. 巻 107
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 2021年
3. 雑誌名 Tetsu-to-Hagane	6. 最初と最後の頁 923 ~ 933
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2021-078	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 Saengdeejing Arkapol, Chen Ying, Takeda Osamu, Enoki Masanori, Sugimoto Satoshi, Ohtani Hiroshi, Taichi Abe	4. 巻 75
2. 論文標題 Sm-Ti binary thermodynamic database and phase diagram	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 102357 ~ 102357
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2021.102357	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 Li Haoge, Ruan Jingjing, Ueshima Nobufumi, Oikawa Katsunari	4. 巻 867
2. 論文標題 Investigation on the γ -phase-related equilibria in Cr-Mn-Co system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 159024 ~ 159024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2021.159024	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 Ruan Jingjing, Ueshima Nobufumi, Li Haoge, Oikawa Katsunari	4. 巻 20
2. 論文標題 Phase equilibria, martensitic transformations and deformation behaviors of the subsystem of Cantor alloy-low-cost Fe-Mn-Cr alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materialia	6. 最初と最後の頁 101231 ~ 101231
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtla.2021.101231	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 Abe Taichi	4. 巻 62
2. 論文標題 Effect of Short-Range Ordering in High-Entropy Alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 711 ~ 718
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.mt-m2021022	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 Watanabe Hiroyuki, Murata Toru, Ikeo Naoko, Mukai Toshiji, Han Kwangsik, Tsuchiya Koichi	4. 巻 18
2. 論文標題 Effect of initial microstructure on grain refinement under hot compression in CrMnFeCoNi high-entropy alloy with Al addition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materialia	6. 最初と最後の頁 101172 ~ 101172
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtla.2021.101172	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 Han Kwangsik, Lee Inho, Ohnuma Ikuo, Kainuma Ryosuke	4. 巻 888
2. 論文標題 Formation and growth behavior of intermetallic compound phases in the interfacial reaction of solid Fe / liquid Zn at 450 °C	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 161562 ~ 161562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2021.161562	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 Okuda Kaneharu, Han Kwangsik, Kainuma Ryosuke	4. 巻 107
2. 論文標題 Recrystallization Behavior of IF Steel at the Interface of Aluminum Junction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Tetsu-to-Hagane	6. 最初と最後の頁 345 ~ 355
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2020-116	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 Omori Toshihiro, Ando Keisuke, Ohnuma Ikuo, Kainuma Ryosuke, Ishida Kiyohito	4. 巻 42
2. 論文標題 BCC-HCP-FCC Multiple Transformations and Loop in the Fe-Cr-Co-Mn System	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 735 ~ 747
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-021-00901-0	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 Lee I., Han K., Ohnuma I., Kainuma R.	4. 巻 854
2. 論文標題 Experimental determination of phase diagram at 450 °C in the Zn-Fe-Al ternary system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 157163 ~ 157163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2020.157163	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 Matsuura Yuki, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 5
2. 論文標題 Adjoint model for estimating material parameters based on microstructure evolution during spinodal decomposition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 113801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.113801	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 Koyama Toshiyuki、Tsukada Yuhki	4. 巻 73
2. 論文標題 Ludwig-Soret effect formulated from the grain-boundary-phase model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 102269 ~ 102269
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2021.102269	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 小山敏幸	4. 巻 92
2. 論文標題 ハイエントロピー合金における拡散	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 金属	6. 最初と最後の頁 21-26
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 Li Haoge、Ruan Jingjing、Ueshima Nobufumi、Oikawa Katsunari	4. 巻 867
2. 論文標題 Investigation on the γ -phase-related equilibria in Cr-Mn-Co system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 159024 ~ 159024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2021.159024	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 Goto Jundai、Koyama Toshiyuki、Tsukada Yuhki	4. 巻 85
2. 論文標題 Understanding the Anomalous Discontinuous Precipitation in Cu-Ni-X (X = Co,Fe) Alloys Based on CALPHAD Method and Phase-Field Simulation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Institute of Metals and Materials	6. 最初と最後の頁 89 ~ 94
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.J2020037	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 Takeno Shion, Tsukada Yuhki, Fukuoka Hitoshi, Koyama Toshiyuki, Shiga Motoki, Karasuyama Masayuki	4. 巻 4
2. 論文標題 Cost-effective search for lower-error region in material parameter space using multifidelity Gaussian process modeling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 083802 ~ 083802
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.083802	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 Ishiguro Yuya, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 174
2. 論文標題 Phase-field study of the spinodal decomposition rate of phase in oxygen-added Ti-Nb alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109471 ~ 109471
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.109471	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 -

1. 著者名 Hayashi Naohiro, Nakashima Kazuki, Enoki Masanori, Ohtani Hiroshi	4. 巻 84
2. 論文標題 Thermodynamic Analysis of the Al-Mg-Zn Ternary System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Institute of Metals and Materials	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 Enoki Masanori, Sundman Bo, Sluiter Marcel H. F., Selleby Malin, Ohtani Hiroshi	4. 巻 10
2. 論文標題 Calphad Modeling of LRO and SRO Using ab initio Data	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Metals	6. 最初と最後の頁 998 ~ 998
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/met10080998	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 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 Egami M., Ohnuma I., Enoki M., Ohtani H., Abe E.	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 Davey Theresa, Tran Nguyen-Dung, Saengdeejing Arkapol, Chen Ying	4. 巻 71
2. 論文標題 First-principles-only CALPHAD phase diagram of the solid aluminium-nickel (Al-Ni) system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 102008 ~ 102008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2020.102008	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 Kadowaki Mariko, Saengdeejing Arkapol, Muto Izumi, Chen Ying, Masuda Hiroyuki, Katayama Hideki, Doi Takashi, Kawano Kaori, Miura Hideo, Sugawara Yu, Hara Nobuyoshi	4. 巻 163
2. 論文標題 First-principles analysis of the inhibitive effect of interstitial carbon on an active dissolution of martensitic steel	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Corrosion Science	6. 最初と最後の頁 108251 ~ 108251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.corsci.2019.108251	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 Kadowaki Mariko, Saengdeejing Arkapol, Muto Izumi, Chen Ying, Frankel Gerald S., Doi Takashi, Kawano Kaori, Sugawara Yu, Hara Nobuyoshi	4. 巻 167
2. 論文標題 Roles of Interstitial Nitrogen, Carbon, and Boron in Steel Corrosion: Generation of Oxyanions and Stabilization of Electronic Structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of The Electrochemical Society	6. 最初と最後の頁 081503 ~ 081503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/1945-7111/ab8926	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 Fu Zehang, Wang Jinkai, Wang Hao, Lu Xiaogang, He Yanlin, Chen Ying	4. 巻 13
2. 論文標題 Influences of Multicenter Bonding and Interstitial Elements on Twinned α -TiAl Crystal	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials	6. 最初と最後の頁 2016 ~ 2016
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ma13092016	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 Li Haoge, Ruan Jingjing, Ueshima Nobufumi, Oikawa Katsunari	4. 巻 127
2. 論文標題 Experimental investigations of fcc/bcc phase equilibria in the Cr-Mn-Ni ternary system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Intermetallics	6. 最初と最後の頁 106994 ~ 106994
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.intermet.2020.106994	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 Oikawa Katsunari, Ueshima Nobuhumi	4. 巻 71
2. 論文標題 Thermodynamic analysis of KCl-KF-AlCl ₃ -AlF ₃ system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Japan Institute of Light Metals	6. 最初と最後の頁 32 ~ 38
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2464/jilm.71.32	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 Abe Taichi	4. 巻 61
2. 論文標題 Thermal Vacancies in High-Entropy Alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 610 ~ 615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.mt-mk2019008	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 大沼 郁雄	4. 巻 59
2. 論文標題 CALPHAD法による銅合金の結晶粒界偏析計算	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 銅と銅合金	6. 最初と最後の頁 32 ~ 37
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.34562/jic.59.1_32	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 Hara Toshihiro, Egusa Daisuke, Mihara Mami, Tanaka Hiroki, Ohnuma Ikuo, Abe Eiji	4. 巻 84
2. 論文標題 Work Softening Phenomena in Al-Fe Alloys: the Impurity-Scavenging Effect of the δ -Al ₁₃ Fe ₄ Phase	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Institute of Metals and Materials	6. 最初と最後の頁 406 ~ 412
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.J2020031	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 Lee I., Han K., Ohnuma I., Kainuma R.	4. 巻 854
2. 論文標題 Experimental determination of phase diagram at 450 °C in the Zn-Fe-Al ternary system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 157163 ~ 157163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2020.157163	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 Kainuma R., Umino R., Xu X., Han K., Omori T.	4. 巻 41
2. 論文標題 Phase Equilibria at 1373 K in the Ni-Rich Portion of Ni-Ti-Sb Ternary System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 116 ~ 122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-020-00784-7	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 Lee Doyup, Omori Toshihiro, Han Kwangsik, Hayakawa Yasuyuki, Kainuma Ryosuke	4. 巻 60
2. 論文標題 Texture Formation in a Polycrystalline Fe-Ni-Co-Al-Ti-B Shape Memory Alloy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 2973 ~ 2982
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2020-199	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 Koyama Toshiyuki, Ohno Munekazu, Yamanaka Akinori, Kasuya Tadashi, Tsukamoto Susumu	4. 巻 61
2. 論文標題 Development of Microstructure Simulation System in SIP-Materials Integration Projects	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 2047 ~ 2051
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MA2020001	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 大沼郁雄	4. 巻 25
2. 論文標題 Fe基合金状態図の決定と熱力学解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 436-442
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 Ishiguro Yuya, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 174
2. 論文標題 Phase-field study of the spinodal decomposition rate of phase in oxygen-added Ti-Nb alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109471 ~ 109471
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.109471	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 Tsukada Yuhki, Takeno Shion, Karasuyama Masayuki, Fukuoka Hitoshi, Shiga Motoki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 9
2. 論文標題 Estimation of material parameters based on precipitate shape: efficient identification of low-error region with Gaussian process modeling	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 15794 ~ 15794
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-52138-0	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 Nomoto Sukeharu, Wakameda Hiroshi, Segawa Masahito, Yamanaka Akinori, Koyama Toshiyuki	4. 巻 27
2. 論文標題 Solidification analysis by non-equilibrium phase field model using thermodynamics data estimated by machine learning	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 084008 ~ 084008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-651X/ab3379	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 Shibata, M. Enoki, N. Saji, H. Tai, M. Koyama, H. Ohtani, N. Tsuji, K. Tsuzaki	4. 巻 50A
2. 論文標題 Effect of Hydrogen on the Substructure of Lenticular Martensite in Fe-31Ni Alloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Metallurgical and Materials Transactions A	6. 最初と最後の頁 4027 ~ 4036
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11661-019-05320-y	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 Kawano S., Iikubo S., Ohtani H.	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 ~ 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 藤原英道、金子 洋、大谷博司、榎木勝徳、宇都宮 裕	4. 巻 58
2. 論文標題 銅合金における加工組織シミュレーションモデルを用いた変形双晶組織と強度の解析	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 銅と銅合金	6. 最初と最後の頁 45 ~ 51
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 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 Egami M., Ohnuma I., Enoki M., Ohtani H., Abe E.	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 & Design	6. 最初と最後の頁 108452 ~ 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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Wang Lei, Wang Cong, Chen Ying	4. 巻 31
2. 論文標題 Black phosphorene exhibiting negative thermal expansion and negative linear compressibility	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 465003 ~ 465003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab3673	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 Wang Hao, Kohyama Masanori, Tanaka Shingo, Wang JinKai, Chen Ying	4. 巻 31
2. 論文標題 Failure mode in first-principles computational tensile tests of grain boundaries: effects of a bulk-region size, dominant factors, and local-energy and local-stress analysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 095001 ~ 095001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/aaf7f2	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 Ruan J.J., Ueshima N., Oikawa K.	4. 巻 814
2. 論文標題 Growth behavior of the γ -Ni ₃ Nb phase in superalloy 718 and modified KJMA modeling for the transformation-time-temperature diagram	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 152289 ~ 152289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2019.152289	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. Zhou, D.H. Song, N. Kiu, N. Ueshima, K. Oikawa	4. 巻 28
2. 論文標題 Influence of Y-Rich Compounds on High-Cycle Fatigue Performance of Y-Doped M951 Superalloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Engineering and Performance	6. 最初と最後の頁 6053-6062
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11665-019-04383-7	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 Ohnuma Ikuo, Shimenouchi Shota, Omori Toshihiro, Ishida Kiyohito, Kainuma Ryosuke	4. 巻 67
2. 論文標題 Experimental determination and thermodynamic evaluation of low-temperature phase equilibria in the Fe-Ni binary system	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 101677 ~ 101677
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2019.101677	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 阿部太一、下野昌人、中村健	4. 巻 105
2. 論文標題 Fe中の熱空孔の生成に及ぼす磁気転移の影響	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 鉄と鋼	6. 最初と最後の頁 1090 ~ 1097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2019-041	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 大沼郁雄	4. 巻 24
2. 論文標題 平衡相はなんだろう	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 82 ~ 88
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 大沼郁雄	4. 巻 69
2. 論文標題 計算状態図 (CALPHAD) の進展と軽金属への応用	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 軽金属	6. 最初と最後の頁 340 ~ 347
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 小山敏幸,	4. 巻 -
2. 論文標題 ハイエントロピー合金における拡散と熱力学	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 日本金属学会シンポジウム予稿「ハイエントロピー合金の材料科学」	6. 最初と最後の頁 9 ~ 14
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 Ishiguro Yuya, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 151
2. 論文標題 Phase-field simulation of spinodal decomposition and its effect on stress-induced martensitic transformation in Ti-Nb-O alloys	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 222 ~ 230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2018.05.003	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 Mouri Masato, Tsukada Yuhki, Koyama Toshiyuki	4. 巻 105
2. 論文標題 Phase-field Simulation of the Effect of Interphase Boundary Diffusion on Pearlite Transformation in Fe-C System	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Tetsu-to-Hagane	6. 最初と最後の頁 305 ~ 313
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-081	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 Iikubo S., Shimoyama K., Kawano S., Fujii M., Yamamoto K., Matsushita M., Shinmei T., Higo Y., Ohtani H.	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 ~ 015008
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 Hirata K., Iikubo S., Koyama M., Tsuzaki K., Ohtani H.	4. 巻 49
2. 論文標題 First-Principles Study on Hydrogen Diffusivity in BCC, FCC, and HCP Iron	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Metallurgical and Materials Transactions A	6. 最初と最後の頁 5015 ~ 5022
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11661-018-4815-9	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, Ohtani Hiroshi	4. 巻 105
2. 論文標題 Monte Carlo Simulation for Formation of Ti and N Atoms Nanoclusters in BCC-Fe	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Tetsu-to-Hagane	6. 最初と最後の頁 334 ~ 342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2018-111	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 Abe Taichi, Chen Ying, Saengdeejing Arkapol, Kobayashi Yoshinao	4. 巻 154
2. 論文標題 Computational phase diagrams for the Nd-based magnets based on the combined ab initio /CALPHAD approach	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 305 ~ 310
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2018.01.030	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 -

1. 著者名 Liu Chang, Asato Mitsuhiro, Fujima Nobuhisa, Hoshino Toshiharu, Chen Ying, Mohri Tetsuo	4. 巻 59
2. 論文標題 Real Space Cluster Expansion for Total Energies of Pd-Rich PdX (X = Rh, Ru) Alloys, Based on Full-Potential KKR Calculations: An Approach from a Dilute Limit	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1669 ~ 1676
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.M2018194	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 Han K., Ohnuma I., Okuda K., Kainuma R.	4. 巻 737
2. 論文標題 Experimental determination of phase diagram in the Zn-Fe binary system	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 490 ~ 504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2017.11.320	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 Hagisawa Takehito, Omori Toshihiro, Ohnuma Ikuo, Kainuma Ryosuke, Ishida Kiyohito	4. 巻 59
2. 論文標題 Effects of Liquid Indium Particles on Recrystallization and Grain Growth of Fe in Fe-In Alloys	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 188 ~ 197
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MC201707	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 Abe Taichi, Shimono Masato, Hashimoto Kiyoshi, Kocer Cenk	4. 巻 21
2. 論文標題 Gibbs energy functions with the vacancy complexes in the Al-Cu binary system	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Data in Brief	6. 最初と最後の頁 432 ~ 440
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dib.2018.09.092	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 Abe Taichi, Shimono Masato, Hashimoto Kiyoshi, Kocer Cenk	4. 巻 63
2. 論文標題 A description of vacancy complexes in an FCC solid solution within the framework of the CALPHAD Method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Calphad	6. 最初と最後の頁 100 ~ 106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.calphad.2018.08.010	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 大沼郁雄	4. 巻 57
2. 論文標題 Cu合金の熱力学データベース構築と構造材料開発への応用	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 まてりあ	6. 最初と最後の頁 420 ~ 425
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.57.420	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 該当する

1. 著者名 小山敏幸、塚田祐貴	4. 巻 23
2. 論文標題 材料工学へのデータサイエンス手法の適用	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 680 ~ 686
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 該当する

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ミクロ組織	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 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 該当する

〔学会発表〕 計129件（うち招待講演 40件 / うち国際学会 35件）

1. 発表者名 大谷博司, 鈴木 昂生, 榎木 勝徳
2. 発表標題 第一原理計算に基づく理論状態図の構築と準安定物質創成に関する研究
3. 学会等名 日本金属学会 日本鉄鋼協会 軽金属学会 九州支部合同学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Chang Liu, X. Wang and Jun Ni
2. 発表標題 Stability of transition metal high entropy alloys: from First-principles and machine learning
3. 学会等名 TMS 2023（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ying Chen, Theresa Davey
2. 発表標題 Stability of intermetallic phases in Cr-alloy coated Zr-alloy cladding of nuclear fuel element: A first-principles study
3. 学会等名 PBNC 2022（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 及川勝成、上島伸文
2. 発表標題 CrMnFeCoNi合金系の熱力学データベース構築
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 拡散解析：基礎から最先端へ
3. 学会等名 日本金属学会セミナー（特別講座）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 構成式のアナロジーとフェーズフィールド解析に基づく統合型複合材料設計
3. 学会等名 日本金属学会2023年春期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 榎木勝徳，大谷博司
2. 発表標題 第一原理クラスター展開を用いた合金中の SRO と MSAD の評価
3. 学会等名 第32回日本MRS年次大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大谷博司，鈴木 昂生，榎木 勝徳
2. 発表標題 第一原理計算に基づく理論状態図の作成
3. 学会等名 日本金属学会 2023年春期大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木 昂生, 榎木 勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 Al-Cu二元系のG.Pゾーン形成に関する熱力学的検討
3. 学会等名 日本金属学会 2023年春期大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 韓 光植, 阿部 太一, 大沼 郁雄
2. 発表標題 700 におけるCo-Cr-Mn三元系平衡状態図の実験的決定
3. 学会等名 日本金属学会第172回春期講演大会
4. 発表年 2023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における規則-不規則変態挙動の熱力学的解析
3. 学会等名 日本金属学会 2022年秋期 (第171回) 講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 金属材料中の準安定ナノクラスター
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nguyen-Dung Tran, Ying Chen
2. 発表標題 DFT investigation of FeNiCoCrMnAl and FeNiCoCrPdAl high entropy alloys: fully disordered versus partially disordered
3. 学会等名 TMS 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Theresa Davey, Ying Chen
2. 発表標題 First-principles investigation of alloying element migration and intermetallic phase formation in a Cr-alloy coated Zr-alloy accident tolerant nuclear fuel system
3. 学会等名 TMS 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nguyen-Dung Tran, Ying Chen
2. 発表標題 Solid solution and partially disordered FeNiCoCrMnAl and FeNiCoCrPdAl high entropy alloys: an insight from first -principles
3. 学会等名 HEA International Workshop (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S.P. Pendem, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Atomic mobility assessment in ternary fcc Co-Cr-Mn system
3. 学会等名 MS&T2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. P. Pendem, N. Ueshima, K. Oikawa, Y. Tsukada, T. Koyama
2. 発表標題 Kinetic and thermodynamic assessment in ternary fcc Co-Cr-Mn alloy
3. 学会等名 本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄子智明, 上島伸文, 及川勝成
2. 発表標題 Fe-Mn-Ni系合金における相互拡散係数の決定
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮崎紘平, 上島伸文, 及川勝成
2. 発表標題 Co-Mn-Ni系合金の相互拡散係数の決定
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Theresa Davey, Ying Chen
2. 発表標題 Intermetallic phase formation and alloying element migration in a Cr-alloy coated Zr-alloy cladding system
3. 学会等名 NuMat 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nguyen-Dung Tran, Ying Chen
2. 発表標題 DFT calculations of stability of FeNiCoMn, FeNiCrMn and Pd-sub-Mn effects
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Saengdeejing Arkapol, Chen Ying
2. 発表標題 Thermodynamic database of the Sm-Fe-B ternary system from first-principles calculations
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Theresa Davey, Ying Chen
2. 発表標題 Migration of alloying elements and formation of intermetallic phases between chromium- based and zirconium-based alloys
3. 学会等名 TOFA 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ying Chen, Lei Wang, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 First-principles study of phase transformation in zirconia: electronic structure, phonon dispersion and symmetry analysis
3. 学会等名 PTM 2020(postponed, online, June 27-23, 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 櫻井一輝, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 自動微分を用いた拡散対プロファイルの解析
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長尾一生, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 ガラスにおける組織ドメイン境界移動のモデリング
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村太一, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 Mg合金のベークハード処理における転位固着力のフェーズフィールド解析
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 塚田祐貴, 舟本将崇, 松岡佑亮, 小山敏幸
2. 発表標題 CALPHADデータベースを活用した多成分系合金の粒界偏析予測
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 塩谷俊佑, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 Fe-Zn合金の界面相形成に対するフェーズフィールド解析とアジョイント法への展開
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第184回秋季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 是永琢斗, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 セルフコンシステント・セカント法を用いた複合組織の力学特性解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 李 仁鎬, 韓 光植, 大沼 郁雄, 貝沼 亮介
2. 発表標題 Zn-Fe-Al 3元系相平衡の実験的決定
3. 学会等名 日本鉄鋼協会2022年秋季(第184回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大谷 博司
2. 発表標題 状態図研究会への期待
3. 学会等名 状態図・計算熱力学研究会 第二回研究会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 榎木 勝徳, 大谷 博司
2. 発表標題 第一原理計算を用いたハイエントロピー合金の熱力学的安定性と短範囲規則化傾向の評価
3. 学会等名 状態図・計算熱力学研究会 第二回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大谷 博司
2. 発表標題 合金状態図計算法の現在と未来
3. 学会等名 日本金属学会東海支部 2021年度 本多光太郎記念講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿部 太一, 韓 光植, 大沼 郁雄
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の熱力学
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 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における短範囲規則をどう理解するか?
3. 学会等名 状態図・計算熱力学研究会 第2回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 フェーズフィールド法に基づく相分離シミュレーションと材料特性
3. 学会等名 第25回高分子計算機科学研究会講座「理論・シミュレーションの基礎」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における遅い拡散の可能性に対する理論解析
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2021年度秋季大会「金属ガラス・ナノ結晶材料および高エントロピー合金の基礎と応用に関する新たな展開」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大谷博司, 榎木勝徳
2. 発表標題 CrFeCoNiM (M=Pd, Pt)合金の熱力学的性質の評価
3. 学会等名 日本金属学会 2021年秋期 (第169回) 講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 クラスター展開法を用いたCantor合金の平均二乗原子変位の評価
3. 学会等名 日本金属学会 2021年秋期 (第169回) 講演大会
4. 発表年 2021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強度に及ぼす因子の熱力学的検討
3. 学会等名 日本金属学会 2022年春期 (第170回) 講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 FCC-FeにおけるB原子対の固溶状態と拡散挙動の電子論的考察
3. 学会等名 日本金属学会 2022年春期 (第170回) 講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大澤洋平, 大谷博司
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 2022年春季 (第183回) 講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tran Nguyen-Dung, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
2. 発表標題 First-Principles Investigation of CrFeNiCoMn and CrFeNiCoPd Quinary High Entropy Alloys
3. 学会等名 The Material Research Meeting 2021, Pacifico Yokohama North, Yokohama, Japan (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tran Nguyen-Dung, Cheng Liu, Ying Chen
2. 発表標題 Prediction of stable solid solution of transition metal ternaries by first-principles calculation and machine learning
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 H.G. Li, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Phase equilibria of the subsystem of Cantor alloy - Cr-Co-Mn alloys
3. 学会等名 The Material Research Meeting 2021, Pacifico Yokohama North, Yokohama, Japan (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S.P. Pendem, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Phase equilibria and Diffusion kinetics in Fe-Co-Mn ternary system
3. 学会等名 The Material Research Meeting 2021, Pacifico Yokohama North, Yokohama, Japan (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 李浩歌, 上島伸文, 及川勝成
2. 発表標題 Cr-Mn系とCr-Mn-Co系状態図の熱力学アセスメント
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 スリ プラグナ ベンデム, 上島伸文, 及川勝成
2. 発表標題 Interdiffusion in Co-Fe-Mn alloys
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2021年度秋季大会 (第128回講演大会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 スリ プラグナ ベンデム, 上島伸文, 及川勝成,
2. 発表標題 Diffusion Kinetics in Ternary Co-Fe-Mn Alloy
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期(第169回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 ハイレントロピー合金の短範囲規則をどう理解するか?
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松浦祐樹, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 アジョイント法によるスピノーダル分解のフェーズフィールドモデルパラメータの推定
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松浦祐樹, 小山敏幸, 塚田祐貴, 中澤克昭, 溝口照康
2. 発表標題 アジョイント法による一般化KJMA式のパラメータ推定
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮原広行, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 連続冷却過程で形成されるTi-Nb-O合金の 相相分離組織のマルテンサイト変態への影響
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊藤航亮, 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 多成分Ni基耐熱合金の 組織形成に対する工学的シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2022年春期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Koyama
2. 発表標題 Estimation of Material Parameters in High-Entropy Alloy by Adjoint Method Derived from Phase-Field Method
3. 学会等名 2020 MRS Fall Meeting (Virtual) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Chen, T. Nguyen-Dung and A. Saengdeejing
2. 発表標題 High entropy alloy effect on stability of potential permanent magnets
3. 学会等名 TMS2020(Virtual) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小山敏幸, 大谷博司, 及川勝成, 阿部太一
2. 発表標題 計算熱力学・計算組織学・データ科学のハイエントロピー合金への応用
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 計算熱力学および計算組織学に基づく安定相・安定組織の材料デザイン
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 材料設計計算工学の未来はここに!!!
3. 学会等名 産学官連携交流会 in 松本 2020 産業技術の芽シーズ発表会, オンライン (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 Cantor 合金における短範囲規則化傾向と機械的特性との関係
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 陳迎, Tran Nguyen-Dung, Saengdeejing Arkapol
2. 発表標題 ハイエントロピー合金の安定性と熱力学特性の第一原理計算: CrFeNiCoMnとCrFeNiCoPdの場合
3. 学会等名 日本金属学会 2021年春期 (第168回) 講演大会, オンライン (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 舟本将崇, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 粒界相モデルに基づくNi 基耐熱合金における粒界偏析計算
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松浦祐樹, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸, 中澤克昭, 溝口照康
2. 発表標題 ガラスのスピンノーダル分解組織に基づく材料パラメータ推定法の構築
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森 祥吉, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 Mg 合金の転位偏析に対するフェーズフィールド解析
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大谷博司, 榎木 徳
2. 発表標題 電子論計算に基づく理論状態図の構築
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 柳 玉恒, 堀内寿晃, 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 モンテカルロ法を用いた Co-Nb 2 元系 fcc 相における準安定平衡状態図の計算
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
2. 発表標題 First-principles Study of Stability in of (Sm,X)(Fe,Y) ₁₂ with Multi-elements Alloying
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 J. J. Ruan, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Phase equilibria in Mn rich corner in Mn-Fe-Cr ternary system
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. G. Li, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Experimental investigations on Cr-Co-Mn ternary phase diagram
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期 (第167回) 講演大会, オンライン
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tran Nguyen-Dung, Ying Chen
2. 発表標題 Computation of Thermodynamics and Stability of FeNiCoCr(Mn/Pd) High Entropy Alloys: Competition between Equiatomic and Non-equiatomc
3. 学会等名 TMS 2021 (virtual) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 J. J. Ruan, H. G. Li, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Martensitic transformation in Ni-Ga-Cr system
3. 学会等名 日本金属学会2021年春期(第168回)講演大会、オンライン
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. P. Pendem, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Phase equilibria and diffusion kinetics in Fe-Co-Mn ternary system
3. 学会等名 日本金属学会2021年春季(第168回)講演大会、オンライン
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. G. Li, N. Ueshima, K. Oikawa
2. 発表標題 Investigation and thermodynamic assessment on the γ -phase-related equilibria in Cr-Mn-Co system
3. 学会等名 日本金属学会2021年春季(第168回)講演大会、オンライン
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における遅い拡散の可能性について
3. 学会等名 日本金属学会2021年春季(第168回)講演大会、オンライン
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤勇気, 小山敏幸
2. 発表標題 "チタン合金の析出相形状変化に基づく材料パラメータ推定(ポスター発表)"
3. 学会等名 日本金属学会・日本鉄鋼協会東海支部第29回学生による材料フォーラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木竣, 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 拡散対データとアジョイント法を活用したハイエントロピー合金における材料パラメータ推定
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 石黒雄也, 塚田祐貴, 小山敏幸,
2. 発表標題 Ti-Nb-O合金の連続冷却中に生じる 相相分離と冷却速度の関係 (ポスター発表)
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 松浦祐樹, 加藤大暉, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 三元系スピノーダル分解のフェーズフィールドモデルにおけるパラメータ推定法の構築
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 松永一努, 小山敏幸, 塚田祐貴, 野本祐春
2. 発表標題 計算熱力学と機械学習を活用したハイエントロピー合金の固溶体条件推定
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 塚田祐貴, 村井良洋, 小山敏幸,
2. 発表標題 鉄鋼のマルテンサイト変態組織に及ぼす材料パラメータの影響
3. 学会等名 日本計算工学会第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小山敏幸, 鈴木竣, 塚田祐貴
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における緩和拡散の妥当性について
3. 学会等名 日本金属学会春期大会
4. 発表年 2020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 M. Enoki, H. Ohtani,
2. 発表標題 Study of thermodynamic stability of HEA alloy using first principles calculation
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Nguyen-Dung and Y. Chen
2. 発表標題 Stability of Medium-Entropy FeNiCoCrMn/Pd Ternaries: A First Principle Study
3. 学会等名 日本金属学会2020年春季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Li, N. Ueshima and K. Oikawa
2. 発表標題 Experimental determination and thermodynamic evaluation of Cr-Mn-Ni system
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Li, N. Ueshima and K. Oikawa
2. 発表標題 Experimental investigation on Cr-Ni-Mn ternary phase diagram
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春季 第166回講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 J. J. Ruan, N. Ueshima and K. Oikawa,
2. 発表標題 Experimental investigations on the phase equilibria of ternary Fe-Mn-Cr system
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春季 第166回講演大会
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 I. Ohnuma, T. Hara and T. Ohmura
2 . 発表標題 Calculation of grain boundary segregation in steels by CALPHAD method
3 . 学会等名 CALPHAD 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Omori, K. Ando, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida
2 . 発表標題 BCC-HCP-FCC Multiple Martensitic Transformations in Fe-Co-Cr-Mn High Entropy Alloys
3 . 学会等名 CALPHAD 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 R. Ishikawa, K. Han, I. Ohnuma, R. Kainuma,
2 . 発表標題 Experimental determination of phase diagrams in the Al-Fe-Si ternary system
3 . 学会等名 CALPHAD 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 K. Han, I. Ohnuma, I. Lee, Y. Hayakawa, R. Kainuma
2 . 発表標題 Variation of interfacial compositions with increasing reaction time in solid Fe / liquid Zn diffusion couples
3 . 学会等名 CALPHAD 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Abe, M. Shimono
2. 発表標題 Magnetic contributions on the vacancy formation in pure elements
3. 学会等名 CALPHAD2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Abe, T. Koyama, I. Ohnuma
2. 発表標題 Formation of the thermal vacancy in high entropy alloys
3. 学会等名 MRS2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 韓 光植, 大沼 郁雄, 阿部 太一,
2. 発表標題 Experimental determination and computational examination of phase diagrams in the ternary systems involved in High Entropy Alloys
3. 学会等名 日本金属学会2020年春季大会,
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Ohtani, M. Enoki
2. 発表標題 Study on thermodynamic properties of high entropy alloys", PRICM 10, Xi ' an China, August 18-22, 2019.
3. 学会等名 PRICM 10 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Chen, T. Nguyen-Dung and A. Saengdeejing
2. 発表標題 High entropy alloy effect on stability of potential permanent magnets
3. 学会等名 TMS2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Chen, T. Nguyen-Dung and A. Saengdeejing
2. 発表標題 Effects of Random mixing and high entropy on stability of promising new permanent magnets
3. 学会等名 ACCMS-10 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小山敏幸, 鈴木竣, 塚田祐貴
2. 発表標題 フェーズフィールド法およびデータ同化手法の銅合金への適用
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 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 材料組織シミュレーションと機械学習・データ同化
3. 学会等名 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ第8回MI2Iフォーラム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 計算熱力学・計算組織学・材料情報学による材料設計の加速
3. 学会等名 金属第59回・鉄鋼第62回中国四国支部講演大会，本多光太郎記念講演（招待講演）
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 小山敏幸
2. 発表標題 ハイエントロピー合金における拡散と熱力学
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 小山敏幸
2. 発表標題 材料設計計算工学へのデータサイエンスの適用
3. 学会等名 革新材料研究センターセミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小山敏幸, 鈴木竣, 塚田祐貴
2. 発表標題 新しい多元系材料ハイエントロピー合金の現状と未来
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Koyama, Y. Tsukada
2. 発表標題 Microstructure-property analysis accelerated by machine learning technique with phase-field method and image-based property calculations
3. 学会等名 The 13th World Congress on Computational Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石戸大貴, 塚田祐貴, 小山敏幸
2. 発表標題 材料組織変化の情報を用いた準安定相のギブスエネルギーパラメーター推定
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 鈴木竣, 塚田祐貴, 小山敏幸,
2. 発表標題 拡散対データとアジョイント法を活用した材料パラメータ推定
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 松永一努, 塚田祐貴, 小山敏幸, 野本祐春
2. 発表標題 機械学習を活用したフェーズフィールド計算手法の改良
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 清水睦博, 塚田祐貴, 小山敏幸,
2. 発表標題 機械学習を援用した不均一組織の特徴量と材料特性の関連性の解明
3. 学会等名 日本金属学会・日本鉄鋼協会東海支部第28回学生による材料フォーラム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松永一努, 水谷巧, 松岡佑亮, 塚田祐貴, 小山敏幸,
2. 発表標題 ニューラルネットワークを活用したフェーズフィールド計算手法の改良
3. 学会等名 日本金属学会日本鉄鋼協会東海支部第28回学生による材料フォーラム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 フェーズフィールド法・特性計算・インフォマティクスによる次世代材料開発
3. 学会等名 平成30年度AMICセミナー「産業技術の芽」シーズ発表会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 計算熱力学および計算組織学の将来展望", 第59回素形材技術担当者会議,
3. 学会等名 第59回素形材技術担当者会議 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 計算組織学の観点から眺めた構造材料研究の最近の進展
3. 学会等名 本多光太郎・湯川記念合同講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 計算熱力学・計算組織学・材料情報学の連携による材料開発の加速
3. 学会等名 東北大学金属材料研究所 計算材料科学センターセミナー (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸
2. 発表標題 CALPHAD法とフェーズフィールド法を活用した先進材料開発
3. 学会等名 次世代計測加工技術者養成事業「デジタル技術×モノづくり」セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Ohtani, M. Enoki
2. 発表標題 Thermodynamic approach to grain boundary segregation
3. 学会等名 CALPHAD XLVII (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 矢部岳大, 榎木勝徳, 大谷博司
2. 発表標題 モンテカルロ法を用いたMg-Nd合金の時効初期過程の熱力学的検討
3. 学会等名 日本金属学会第163回講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
2. 発表標題 First-principles-only phase diagram for the Al-Ni system
3. 学会等名 日本金属学会2019春期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran and Ying Chen
2. 発表標題 Exploring first principles-based phase diagrams using a modified CALPHAD approach
3. 学会等名 CALPHAD 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大沼郁雄, 原徹, 大村孝仁,
2. 発表標題 CALPHAD法による鉄鋼材料の粒界偏析計算
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第175回秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 I. Lee, K. Han, I. Ohnuma, R. Kainuma
2. 発表標題 Phase equilibria in the Zn-Fe-Al ternary system at 450 °C
3. 学会等名 TOFA 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani, E. Abe
2. 発表標題 Thermodynamic Evaluation of Segregation and Local Ordering Behavior in Dilute Mg-Zn-Y alloy
3. 学会等名 TOFA 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Han, I. Lee, I. Ohnuma, Y. Hayakawa, R. Kainuma
2. 発表標題 Formation reactions of intermetallic compound layers in pure Fe / molten Zn diffusion couple held at 450C
3. 学会等名 TMS 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 I. Lee, K. Han, I. Ohnuma, R. Kainuma
2. 発表標題 Reassessment of Zn-rich corner phase diagrams in the Zn-Fe-Al ternary system
3. 学会等名 TMS 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Tsukada, E. Harata, T. Koyama
2. 発表標題 Microstructure-property analysis accelerated by machine learning technique with phase-field method and image-based property calculations
3. 学会等名 The 13th World Congress on Computational Mechanics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Full first-principles calculation of oxygen self-diffusion and thermal expansion in Zirconia
3. 学会等名 ICM3-2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山敏幸, 塚田祐貴
2. 発表標題 計算熱力学・計算組織学・情報材料学の融合によるハイエントロピー合金設計の加速
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期大会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 阿部太一
2. 発表標題 格子欠陥の熱力学
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，平成30年度第2回合同研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計4件

1. 著者名 烏山昌幸，竹野思温，塚田祐貴，小山敏幸，志賀元紀	4. 発行年 2021年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 500
3. 書名 マテリアルズインフォマティクスのためのデータ作成とその解析・応用事例，第4章 第5節 精度と観測コストのトレードオフを考慮したベイズ的探索法：材料パラメータ推定での適用事例	

1. 著者名 乾 晴行(編著) [1章(小山,大谷)，2章(小山,阿部)]	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	

1. 著者名 阿部太一	4. 発行年 2019年
2. 出版社 内田老鶴圃	5. 総ページ数 208
3. 書名 材料設計計算工学 計算熱力学編（増補新版）	

1. 著者名 小山敏幸	4. 発行年 2019年
2. 出版社 内田老鶴園	5. 総ページ数 170
3. 書名 材料設計計算工学 計算組織学編 (増補新版)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>材料の組織と特性解析に対する計算工学的手法の開発 (Phase-fieldモデリング) https://www.material.nagoya-u.ac.jp/PFM/Phase-Field_Modeling.htm</p> <p>計算状態図データベース (CPDDB) https://cpddb.nims.go.jp/</p>

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	大谷 博司 (Ohtani Hiroshi) (70176923)	公益財団法人豊田理化学研究所・フェロー事業部門・フェロー (73903)	
研究分担者	陳 迎 (Chen Ying) (40372403)	東北大学・工学研究科・教授 (11301)	
研究分担者	及川 勝成 (Oikawa Katsunari) (70356608)	東北大学・工学研究科・教授 (11301)	

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	阿部 太一 (Abe Taichi) (50354155)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・構造材料研究センター・主席研究員 (82108)	

	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
連携研究者	大沼 郁雄 (Ohnuma Ikuo) (20250714)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・構造材料研究センター・主席研究員 (82108)	
連携研究者	榎木 勝徳 (Enoki Masanori) (60622595)	島根大学・学術研究院機能強化推進学系・准教授 (15201)	
連携研究者	上島 伸文 (Ueshima Nobufumi) (10733131)	東北大学・工学研究科・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