

平成 30 年 6 月 12 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H04117

研究課題名(和文)電子論に基づく構造材料の巨視的特性の階層的機構解明

研究課題名(英文) Multi scale simulation of structural materials based on first principles calculations

研究代表者

佐原 亮二 (SAHARA, Ryoji)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・構造材料研究拠点・主幹研究員

研究者番号：30323075

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、構造材料でも(1)鉄鋼、(2)チタン合金、(3)マグネシウム合金、(4)ニッケル合金に的を絞って、機械的特性に代表されるマクロな特性を、合金元素、不純物制御、界面強化機構など、各スケールに現れる素過程を基に、電子論に基づきその起源を解明した。必要に応じて従来の手法の問題点を解決する新規解析手法を提案した。第一原理計算の繰り込みによる粗視化(スケール変換)の手続きを経て、格子モデルまでを繋ぐ、大規模マルチスケールシミュレーションモデルを提案した。得られた結果は電顕観察、硬X線光電子分光法等の実験との連携により定量比較し、今後のより効率的な材料開発について検討した。

研究成果の概要(英文)：It is important to understand the theories governing the structural and electronic properties in structural materials in order to effectively control these properties. In this project, we focused mainly on (1) iron and steel, (2) Ti alloys, (3) Mg alloys, and (4) Ni alloys. We performed multi scale simulation based on first principles calculations. To overcome some shortcomings of conventional methods, we introduced new methodologies such as "partial occupation model" and "super-ion morphology" to analyze properties with higher accuracy. To estimate thermodynamic properties, we introduced the potential renormalization method and perform Monte Carlo simulation, which is a "multi scale simulation" based on first principles calculations. Results were compared with experimental data obtained by TEM and HAXPES etc.

研究分野：計算材料学

キーワード：第一原理計算 構造材料 モンテカルロ法 クラスタ変分法 マルチスケール解析 繰り込み 炭化物 鉄鋼

1. 研究開始当初の背景

鉄鋼材料やチタン合金など、構造材料の巨視的な機械的特性の起源を原子・電子レベルまでさかのぼって理論的に理解することは、新規実用材料を高精度で設計するという観点からも非常に重要であるが、これまでの研究は限定されている。この理由として、マクロな特性は合金元素の結合様式のみならず、不純物や欠陥、微細組織等、幅広い空間・時間スケールの要因を介して制御されることが挙げられる。異なるスケールに対して異なる計算手法を各々単独に扱うという「マルチスケールシミュレーション」報告例はあるが、第一原理計算結果を、異なる手法間の境界条件を適切に考慮し、シームレスにマクロなスケールへ引き渡せるモデル開発が重要である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、構造材料の中でも(1)鉄鋼、(2)チタン合金、(3)マグネシウム合金、(4)ニッケル合金に的を絞り、その相安定性や材料特性を、合金元素特性解析、不純物制御、界面強化機構など、各スケールに現れる素過程を基に、電子論と統計力学に基づき定量的に解明することである。必要に応じて、従来の計算手法の問題点を解決する新規手法を提案しながら研究を進める。さらに、第一原理計算結果の繰り込みによる粗視化(スケール変換)の手続きを経て、離散モデル(格子モデル)までをシームレスに繋ぐ、大規模マルチスケールシミュレーションモデルを開発する。

得られた結果は電顕観察、硬 X 線光電子分光法等の実験との連携により定量比較し、モデルの妥当性を検討すると共に、今後のより効率的な構造材料開発の指針とする。

3. 研究の方法

第一原理計算を基に(1)鉄鋼、(2)チタン合金、(3)マグネシウム合金、(4)ニッケル合金の相安定性や材料特性の理論解析を行う。その際、より詳細な解析を可能とするため、必要に応じて従来の解析手法の問題点を解決する手法そのものの提案を行う。例えば、炭化物の相安定性の原子配置依存性を明確に取り込むことが可能な「部分占有モデル」、その安定性の電子状態からの解析を可能とする「スーパーイオンモルフォロジー」の提案を行い、手法の妥当性を検討する。

より高精度で熱力学的諸特性を定量評価する際は、モンテカルロシミュレーションを実行する。その際、第一原理計算結果のスケール変換により、有限温度の格子振動の効果を非調和項まで考慮した多体相互作用を決定する。得られた結果と実験の詳細な比較検討を行い、今後の材料設計の指針を得る。

4. 研究成果

以下、主な研究成果として(1)炭化物 γ - $M_{23}C_6$ の相安定性解析、(2)チタン表面酸化のメカニズムとそのシリコン添加の効果、(3)チタン合金の相安定性に及ぼす添加元素の効果、(4)マグネシウム合金の界面安定性の添加元素の効果、(5)ニッケル合金の熱力学的諸特性解析について、各々、投稿論文あるいは学会発表のリストを挙げながら述べる。

(1)9Cr フェライト系耐熱鋼の高温クリープ特性を制御する多元系炭化物 γ - $M_{23}C_6$ ($M=Fe, Cr$) について、はじめに微量添加ホウ素の効果調べた。検討した系は $(Fe_{1-x}Cr_x)_{23}(B_{1-y}C_y)_6$ ($0 \leq x, y \leq 1$) である。第一原理計算で求めた生成エネルギー等高線マップの作成により、計算した全ての x においてホウ素濃度増加と共により安定になる事が分かった。さらに、本炭化物と母相 (bccFe) 間の界面モデルを作成し、界面エネルギーをホウ素濃度の関数として評価した。現在はまだテスト解析の段階であるが、ホウ素濃度と格子ミスフィットの関数として界面エネルギーを評価している(雑誌論文 8, 9, 10)。

次に、同炭化物の相安定性解析を、従来の解析精度を超えた高精度で行うために、原子配置の情報を取り込む必要性の検討を行った。そのために本研究では、特定の副格子が、Cr と Fe の二種類の元素で占有されるという「部分占有モデル」の新規導入により解析した。第一原理計算と統計力学的手法を用いて相安定性の温度依存性を解析し、従来型モデルではこれまで見つけることができなかった相を新たに見つけることができた。さらに、この結晶相が安定して存在する理由を探るため、原子が複数個集まったクラスターの電子状態を単位として捉える「スーパーイオンモルフォロジー」のアイデアを導入した。その結果、従来はメカニズムの理解が困難であったのに対して、特定の元素がクラスター上の特定の格子を優先的に占有することで各クラスターが安定性を保ち、さらにそのクラスター単位で互いに正負の電荷を持つことで炭化物の安定性が決まるというメカニズムを明らかにした(雑誌論文 1)。

(2) 第一原理分子動力学 (MD) シミュレーションにより、実用温度領域 (~973K) におけるチタン表面酸化機構の初期メカニズムの理論解明をおこなった。さらに本機構に対する添加元素 (Si 等) の効果を明らかにした。その際、温度の効果を調べるためカノニカルアンサンブル (NVT 一定) の MD を導入することで、温度依存性を定量的に明らかにできた。

(1) 純チタンと (2) シリコンを表面に偏析させたモデルを比較すると、低温側 (300K) では (2) の場合にシリコンと酸素の固体内部への拡散が確認されない一方、高温側 (973K) で

は拡散する様子が確認される。今回のシミュレーションにより、シリコンの存在により (i) 固体内部への酸素の拡散が抑制されること、(ii) 表面のチタンの酸化数は純チタンの場合と比べて約 25% 大きい (より安定な酸化物が形成される) 事が分かった。これらの事が、シリコン添加による耐酸化性向上の理由であると結論づけられる。本研究で得られた結果を元に、高温における耐酸化性に優れた合金設計指針を提案する (雑誌論文 3, 4。続報として S. K. Bhattacharya, R. Sahara, S. Suzuki, K. Ueda, and T. Narushima, Mechanism of oxidation of pure and Si-segregated α -Ti surfaces, under review)。

(3) チタン合金の相安定性について、添加元素種とその濃度依存性を系統的に明らかにした。第一原理計算による合金 (固溶体) の研究の問題点として、有限の数の原子によりどのように合金の不規則原子配列を導入するか、が挙げられる。本研究では、不規則原子配列を考慮するため Special Quasirandom Structure (SQS) モデルを導入したアプローチにより、 $Ti_{1-x}X_x$ 合金 ($X=Mo, Nb, Fe, Co, Sn, Zr, Al, 0 \leq x \leq 0.5$, および $0, 0 \leq x < 0.02$) について、チタン合金の基本的な相として bcc 相と hcp 相の相対的な安定性の評価、弾性特性解析を系統的に評価した。

はじめに、生成エネルギーの添加元素種とその x 依存性の解析をおこなった。例えば $X=Mo, Nb$ の場合、bcc 相と hcp 相のエネルギー安定性を評価すると、ある組成 (Mo の場合は約 0.1、 Nb の場合は 0.2) で bcc 相と hcp 相のエネルギーの大小関係が逆転し、相転移が起こる事が分かる。このことから Mo と Nb は β 相安定化元素であるが、 Mo の方が Nb よりその効果が大きい。また、 Al 添加の場合は、 Al 濃度増加と共に hcp 相が安定になる事が分かり、 Al は α 相安定化元素である。本系の場合は Ti_3Al および $TiAl$ 規則相についても計算を行い、本組成では、これらの規則相が不規則相よりエネルギー的に安定であることが確認されている。さらに (d) Zr 添加の場合は bcc 相、hcp 相共に Zr 濃度増加と共に安定性はほぼ変わらず、 Zr は中性元素である。

さらに、bcc 相が安定である場合について、これらの弾性特性の添加元素種と濃度依存性を検討し、電子状態解析から bcc 相と hcp 相の安定性の議論を行った (雑誌論文 6, 7)。

(4) $Mg-Zn-Y$ 合金について、粒界 (双晶、小傾角粒界) の合金元素偏析による強化機構を理論的に明らかにした。これは強加工変形実験に対応する理論研究である。

実験結果に基づき Mg の {10-11} あるいは {10-12} 双晶モデルを作成した。最大 3 個の Mg を Zn (あるいは Y) で置換し、生成エネルギーを評価した。その結果、双晶上に Mg と Zn (Y) が交互に規則的に配置される事で双晶が安

定化される事が分かった。これは双晶上のサイトの大きさと Zn (Y) のイオン半径に依存して、歪みエネルギーを小さくする事で系全体を安定化させるためである。

同様に小傾角粒界モデルを作成して、界面上 1 個の Mg を Zn で置換することで、どのサイトで安定になるかを調べた。その結果、転位に隣接するサイトで Zn と置換された場合に安定となる、つまり Zn による界面安定化が明らかになった。さらに本モデルを用いて、 Zn の他に Bi 等様々な合金元素で置換し、生成エネルギーを系統的に評価し、実験と比較することで、新規合金設計指針を得た (雑誌論文 2, 5)。

(5) 拡散型相転移を示す系の熱平衡状態を記述するのに適しているモデルに、モンテカルロ法 (MC) やクラスター変分法 (CVM) などで使用する格子モデルが挙げられる。一方、格子モデルの問題点として、使用する多体相互作用の正当性が挙げられる。第一原理で決定したとしても、有限温度での相安定性の議論に必要な格子振動の効果を非調和項まで取り入れる事が困難であり、相転移温度が実験値に比べて高く評価される等の不都合が生じる。本研究は、このような問題点を解決するため、第一原理計算の結果を格子モデルに適切にマッピングし、これを MC 計算の多体相互作用とすることで、定量的な計算状態図を作成することを目的とする。多体相互作用を得る際のポイントは、連続空間での分配関数と等しい分配関数を持つ離散系の多体相互作用 (繰り込みポテンシャル) を見出すことである。

本研究では、FCC 格子を有する $NiAl$ 二元系合金に本手法を適用した。なお、 Ni 高濃度側に存在する γ (FCC) 及び γ' (L12) の 2 相組織からなる Ni 基合金は、航空機エンジン用耐熱材料として重要である。テスト計算としてこれまでに、実用温度領域である 1300K において Ni 濃度を変化させながら MC 計算をおこない、オーダーパラメータを評価する事で相転移濃度 (γ' 単相- γ/γ' 二相共存領域、および γ/γ' 二相共存領域- γ 単相) を求めたところ、実験と定量的に比較することが可能な結果が得られた (口頭発表 1, 5 など)。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件) (全件査読有り)
(1) M. Souissi, M. H. F. Sluiter, T. Matsunaga, M. Tabuchi, M. J. Mills, and R. Sahara, Effect of mixed partial occupation of metal sites on the phase stability of γ - $Cr_{23-x}Fe_xC_6$ ($x = 0-3$) carbides, Scientific Reports 8 (2018) 7279.

プレスリリース有り

(2) H. Somekawa, A. Singh, R. Sahara, and

T. Inoue, Excellent room temperature deformability in high strain rate regimes of magnesium alloy, *Scientific Reports* 8 (2018) 656. プレスリリース有り.

(3) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, T. Kitashima, K. Ueda, and T. Narushima, First principles study of oxidation of Si-segregated α -Ti(0001) surfaces, *Jpn. J. Appl. Phys.* 56 (2017) 125701.

(4) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, K. Ueda, and T. Narushima, Effect of Si on the oxidation reaction of α -Ti(0001) surface: ab initio molecular dynamics study, *Sci. Tech. Adv. Mat.* 18 (2017) 998.

(5) D. A. Basha, R. Sahara, H. Somekawa, A. Singh, and K. Tsuchiya, Effect of processing strain rate and temperature on interfacial segregation of zinc in a magnesium alloy, *Mater. Sci. Eng. Eng. A* 703 (2017) 54.

(6) 上杉徳照, 佐原亮二, *チタンの計算材料科学*, *軽金属* 67 (2017) 653.

(7) W. Zhou, R. Sahara, and K. Tsuchiya, First-principles study of the phase stability and elastic properties of Ti-X alloys (X = Mo, Nb, Al, Sn, Zr, Fe, Co, and O), *J. Alloys and Compd.* 727 (2017) 579.

(8) R. Sahara, T. Matsunaga, H. Hongo, and M. Tabuchi, A First Principles Study of Phase Stability and Structural Properties in (Fe,Cr)₂₃(C,B)₆ Compounds, The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9), (2016) 921.

(9) T. Matsunaga, H. Hongo, M. Tabuchi, and R. Sahara, Suppression of grain refinement in heat-affected zone of 9Cr-3W-3Co-VNb steels, *Mater. Sci. and Eng. A* 655 (2016) 168.

(10) R. Sahara, T. Matsunaga, H. Hongo, and M. Tabuchi, Theoretical investigation of stabilizing mechanism by boron in body-centered cubic iron through (Fe,Cr)₂₃(C,B)₆ precipitates, *Metall. Mater. Trans. A* 47 (2016) 2487.

[学会発表] (計 41 件(確定 4 件含む))

(1) Ryoji Sahara et al., (title N/A), The 16th Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys (TOFA 2018), 2018 年 10 月 1 日~10 月 5 日(Seoul, Korea) (Key Note 講演(確定)).

(2) Ryoji Sahara et al., (title N/A), Evolution of Electronic Structure Theory & Experimental Realization (EESTER-2018), 2018 年 9 月 11 日~9 月 13 日(Chennai, India) (招待講演(確定)).

(3) Ryoji Sahara et al., (title N/A), Asian Consortium on Computational Materials Science - Theme Meeting on Multi-scale Modelling of Materials for Sustainable Development, 2018 年 9 月 7 日~9 月 9 日(Hanoi, Vietnam) (招待講演

(確定)).

(4) R. Sahara, D. A. Basha, H. Somekawa, A. Singh, and K. Tsuchiya, Theoretical investigation of the interfacial segregation induced by severe plastic deformation in a Mg-Zn-Y alloy, Nano Korea 2018, 2018 年 7 月 10 日~7 月 13 日(韓国)(口頭発表(確定)).

(5) 佐原亮二, S. Maaouia, S. K. Bhattacharya, M. H. F. Sluiter, 松永哲也, 田淵正明, 上田恭介, 成島尚之, 第一原理計算による耐熱材料設計, ナノ学会第 16 回大会, 2018 年 5 月 10 日~5 月 12 日(東京)(ポスター発表).

(6) R. Sahara, T. Osada, S. Bhattacharyya, and K. Ohno, Absolute value estimation of thermodynamic properties in Ni-Al alloys using a first principles renormalized potential, TMS2018 - 147th Annual Meeting and Exhibition (Phoenix, Arizona, USA), 2018 年 3 月 11 日~3 月 15 日(口頭発表).

(7) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, K. Ueda, and T. Narushima, First Principles Molecular Dynamics Study for Oxidation on Ti Surface at Elevated Temperature, TMS2018 - 147th Annual Meeting and Exhibition (Phoenix, Arizona, USA), 2018 年 3 月 11 日~3 月 15 日(口頭発表).

(8) M. Souissi, S. Darvishi, F. Karimzadeh, M. Kharaziha, R. Sahara, and S. Ahadian, Ni nanoparticle-decorated graphene for non-enzymatic glucose sensing, The 12th General Meeting of ACCMS-V0 (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization), 2017 年 12 月 17 日~12 月 19 日(仙台)(口頭発表).

(9) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, K. Ueda, and T. Narushima, Molecular dynamics study for oxidation on Ti surface at elevated temperature, The 12th General Meeting of ACCMS-V0 (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) 2017 年 12 月 17 日~12 月 19 日(仙台)(口頭発表).

(10) R. Sahara, T. Osada, S. Bhattacharyya, and K. Ohno, Thermodynamic properties in Ni-Al system using a face-centered-cubic lattice model with a first-principles renormalized potential, The 12th General Meeting of ACCMS-V0 (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization) 2017 年 12 月 17 日~12 月 19 日(仙台)(口頭発表).

(11) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, Thermodynamic properties in Ni-Al system using a face-centered-cubic lattice model with a first-principles renormalized potential, 第 3 回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) シンポジウム, 2017 年 12 月 5 日~12 月 6 日(東京)(ポスター).

(12) M. Souissi, T. Matsunaga, R. Sahara, M. H. F. Sluiter, M. Tabuchi, and M. J.

Mills, Effect of metal site occupancy in the stability of $\text{Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ ($x=0-23$) carbide phases, JSPS 合金状態図第 172 委員会第 33 回委員会・研究会, 2017 年 10 月 20 日~10 月 21 日(箱根)(ポスター発表, Best Poster Award 受賞).

(13) 矢部岳大, 佐原亮二, 榎木勝徳, 大谷博司, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた Mg-Nd 合金の相安定性の計算, JSPS 合金状態図第 172 委員会第 33 回委員会・研究会, 2017 年 10 月 20 日~10 月 21 日(箱根)(ポスター発表, Best Poster Award 受賞).

(14) M. Souissi, T. Matsunaga, R. Sahara, M. H. F. Sluiter, M. Tabuchi, and M. J. Mills, Effect of metal site occupancy in the stability of $\text{Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ ($x=0-23$) carbide phases, NIMS WEEK 2017, 2017 年 10 月 4 日(つくば)(ポスター発表, Poster Award 受賞).

(15) 佐原亮二, S. K. Bhattacharya, 上田恭介, 成島尚之, 第一原理計算によるチタン表面の耐酸化特性に及ぼすシリコン添加の効果, チタンの準安定相・析出相研究会: 平成 29 年度第 1 回研究会, 2017 年 9 月 15 日(東京)(口頭発表).

(16) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, K. Ueda, and T. Narushima, Molecular Dynamics study of the high temperature oxidation resistance of Ti surfaces, 日本金属学会 2017 年秋期大会, 2017 年 9 月 6 日~9 月 8 日(札幌)(口頭発表).

(17) 佐原亮二, W. Zhou, 土谷浩一, S. K. Bhattacharya, 上田恭介, 成島尚之, 第一原理計算によるチタンおよびチタン合金の相安定性, 弾性特性, 耐酸化特性解析, 日本金属学会 2017 年秋期大会: 超高耐久性チタン材料の研究 自主フォーラム シンポジウム, 2017 年 9 月 6 日~9 月 8 日(札幌)(招待講演).

(18) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 二元系合金の状態図計算, 日本金属学会 2017 年秋期大会, 2017 年 9 月 6 日~9 月 8 日(札幌)(口頭発表).

(19) M. Souissi, T. Matsunaga, R. Sahara, Marcel H. F. Sluiter, Masaaki Tabuchi, M. J. Mills, Effect of metal site occupancy in the stability of $\text{Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ ($x=0-23$) carbide phases, The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-9), 2017 年 8 月 8 日~8 月 11 日(Kuala Lumpur)(口頭発表, Best Oral Presenter Award 受賞).

(20) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, K. Ueda, and T. Narushima, First Principles Molecular Dynamics study for oxidation on Ti surface at elevated temperature, The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-9), 2017 年 8 月 8 日~8 月 11 日(Kuala Lumpur)(招

待講演).

(21) R. Sahara, W. Zhou, and K. Tsuchiya, Theoretical investigation of the phase stability and elastic property in Ti-X alloys, The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-9), 2017 年 8 月 8 日~8 月 11 日(Kuala Lumpur)(招待講演).

(22) 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 系合金の熱力学的諸特性評価, 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第 2 回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会, 2017 年 7 月 11 日~7 月 12 日(東京)(ポスター発表).

(23) M. Souissi, R. Sahara, M. H. F. Sluiter, T. Matsunaga, and M. Tabuchi, Non-random metal site occupation effect on the formation stability of $\gamma\text{-Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ carbide phases, 14th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (CREEP2017), 2017 年 6 月 18 日~6 月 22 日(Saint Petersburg, Russia)(口頭発表).

(24) R. Sahara, T. Osada, S. Bhattacharyya, and K. Ohno, Thermodynamic properties in Ni-Al system by a first-principles renormalized potential, 14th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (CREEP2017), 2017 年 6 月 18 日~6 月 22 日(Saint Petersburg, Russia)(口頭発表).

(25) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 系合金の熱力学的諸特性, ポスト「京」重点課題(7)サブ課題 E 「高信頼性構造材料」H29 年度第一回研究会プログラム, 2017 年 6 月 12 日(東京)(口頭発表).

(26) M. Souissi, R. Sahara, M. H. F. Sluiter, T. Matsunaga, and M. Tabuchi, First principles study of stability of $\gamma\text{-Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ precipitates: The effect of metal site occupancy, 金属学会 2017 年春期大会, 2017 年 3 月 15 日~3 月 17 日(東京)(口頭発表).

(27) S. K. Bhattacharya, R. Sahara, T. Kitashima, K. Ueda, and T. Narushima, First Principles Molecular Dynamics study for oxidation on Ti surface at elevated temperature, 金属学会 2017 年春期大会, 2017 年 3 月 15 日~3 月 17 日(東京)(口頭発表).

(28) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 二元系合金の状態図計算, 金属学会 2017 年春期大会, 2017 年 3 月 15 日~3 月 17 日(東京)(口頭発表).

(29) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 二元系合金の状態図計算, ポス

ト「京」重点課題(7)と萌芽的課題Aの合同シンポジウム, 2017年1月10日~1月11日(大阪)(口頭発表).

(30) 佐原亮二, W. Zhou, 土谷浩一, 第一原理計算によるTiX合金の相安定性と弾性特性解析, チタンの準安定相・析出相研究部会:平成28年度第2回研究会, 2016年12月26日(東京)(口頭発表).

(31) R. Sahara, First principles study of electronic structures and stability in structural materials, The 11th ACCMS-V0 General Meeting (Asian Consortium on Computational Materials Science-Virtual Organization), 2016年12月19日~12月21日(仙台)(招待講演).

(32) 佐原亮二, S. Bhattacharyya, 長田俊郎, 大野かおる, 繰り込みポテンシャルを用いたNiAl二元系合金の状態図計算, 第2回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム, 2016年12月6日-12月7日(東京)(ポスター発表).

(33) 佐原亮二, 長田俊郎, S. Bhattacharyya, 大野かおる, 第一原理繰り込みポテンシャルを用いたNiAl系合金の熱力学的諸特性, JSPS合金状態図第172委員会第31回委員会・研究会, 2016年10月21日~10月22日(つくば)(口頭発表).

(34) R. Sahara, First principles study of electronic structures and stability in structural materials, Asian Consortium on Computational Materials Science Theme Meeting on First Principle Analysis & Experiment: Role in Energy Research, 2016年9月22日~9月24日(SRM University, Chennai, India)(招待講演).

(35) R. Sahara, and Y. Kawazoe, First principles study of strategic materials by Indo-Japan collaboration, Indo-Japan Scientific Collaboration and Strategic Materials, 2016年9月21日(SRM University, Chennai, India)(招待講演).

(36) R. Sahara, T. Osada, and K. Ohno, Thermodynamic properties of Ni-Al alloys using a first principles renormalized potential, PRICM9, 2016年8月1日~8月5日(京都)(口頭発表).

(37) R. Sahara, T. Matsunaga, H. Hongo, and M. Tabuchi, A first principles study of stabilizing mechanism by boron in body-centered cubic iron through $(\text{Fe, Cr})_{23}(\text{C, B})_6$ precipitates, PRICM9, 2016年8月1日~8月5日(京都)(ポスター発表).

(38) 佐原亮二, S. Bhattacharyya, 長田俊郎, 大野かおる, 繰り込みポテンシャルを用いたNiAl二元系合金の状態図計算, 第1回ポスト「京」重点課題(7)研究会, 2016年7月21日~7月22日(東京)(ポスター発表).

(39) R. Sahara, T. Matsunaga, H. Hongo, and M. Tabuchi, Theoretical investigation of stabilizing mechanism by boron in bcc iron

through $(\text{Fe, Cr})_{23}(\text{C, B})_6$ precipitates, Psi-k 2015 Conference, 2015年9月6日~9月10日(San Sebastian, Spain)(ポスター発表).

(40) R. Sahara, Theoretical investigation of electronic structures and phase stability in structural materials, 1st US-Japan Materials Genome Workshop, 2015年6月23日~6月25日(つくば)(招待講演).

(41) R. Sahara, First principles study of electronic structures and stability in structural materials, The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8), 2015年6月16日~6月18日(台湾)(招待講演).

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

プレスリリース(1): 耐熱鋼内部でどのような炭化物がなぜ安定か、原子レベルで解明~クリープ特性向上を目指した新クリープ特性向上を目指した新しい耐熱鋼設計指針の構築を目指して~

<http://www.nims.go.jp/news/press/2018/05/201805170.html>

プレスリリース(2): 高速変形でも壊れにくいマグネシウム合金の開発~市販アルミニウム合金に匹敵する変形能を実現 自動車などの軽量化貢献に期待~

<http://www.nims.go.jp/news/press/2018/01/201801240.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者 佐原 亮二 (SAHARA, Ryoji)
国立研究開発法人物質・材料研究機構、構造材料研究拠点・主幹研究員
研究者番号: 30323075

(2) 研究分担者 土谷 浩一
(TSUCHIYA, Koichi)
国立研究開発法人物質・材料研究機構、構造材料研究拠点・拠点長
研究者番号: 50236907

(3) 連携研究者 (該当無し)

(4) 研究協力者 (該当無し)