

令和 4 年 6 月 22 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04993

研究課題名(和文)電子構造に基づく非経験的合金設計手法の開発

研究課題名(英文)Development of nonempirical alloy design scheme through electronic structure calculations

研究代表者

都留 智仁 (Tsuru, Tomohito)

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

研究者番号：80455295

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：BCC金属では力学特性は合金元素の濃度と温度が関係する複雑な挙動を示すことが知られており、あらゆる条件下で特性を予測することは困難である。本研究では、BCC金属の変形の基礎となる転位運動がキンク形成と運動の2つの熱活性化過程によることに注目した。合金元素の転位運動への影響を原子モデルから直接評価し、その結果と熱活性化過程に基づく理論をつなぐ枠組みを開発することによって、温度に依存した複雑な力学挙動の記述を可能にした。そして、合金元素との相互作用は従来理論である弾性相互作用に基づく機構に対して、マトリクスと合金元素の電子間相互作用が支配的な役割を果たすことを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究から、BCC金属において合金元素の違いによって系統的な変化を生じる要因が、力学的な相互作用に対して、マトリクスの転位と合金元素の電子の結合が支配的な影響を及ぼすためであることが明らかになった。このような化学的な相互作用は、古典的な強化理論では考慮することができないため、BCC合金の力学特性の理解にはとりわけ、電子結合を考慮した議論が必要であることを示唆している。これは、基礎的な特性を電子論的解析によって評価することで、合金化によるマクロな力学特性を予測することが可能であることを示しており、計算科学を用いた今後の材料設計において、重要な役割を果たすと考えられる。

研究成果の概要(英文)：Mechanical properties in BCC metals exhibit complicated behavior related to the concentration of alloying elements and temperature, which makes it difficult to predict mechanical properties under various conditions. In this study, we focus on the fact that dislocation motion, that is the basis of deformation in BCC metals, is due to two thermally activated processes: kink formation and kink migration. The complicated temperature-dependent mechanical behavior of alloy system can be described by evaluating the effects of alloying elements on dislocation motion from an atomic model and developing a framework that links the results with theories based on thermal activation processes. In contrast to the conventional mechanism based on elastic interactions, the interaction between the alloying elements and the matrix is found to be dominated by the electronic interaction.

研究分野：計算材料科学

キーワード：固溶強化 転位運動 熱活性化過程 第一原理計算

1. 研究開始当初の背景

BCC 金属の降伏応力は、他の結晶構造の金属と比べて高い温度依存性を有し、数%の合金元素の違いによって複雑な力学挙動を示す。BCC 金属における合金元素の力学特性への影響として、Cottrell による格子間原子の転位への固着によるという従来の説や、温度への依存性を転位運動の摩擦力によって説明する Conrad の説など、古くから多くの研究が行われてきた。強化の基礎メカニズムがこれらの説で理解される一方、鉄中のシリコン、タングステンやタンタル中のレニウムなどにおいて、低温で濃度の増加に伴って強度が減少する軟化現象が生じることが知られている。そのメカニズムは転位の弾性論だけでは説明ができないため長い間明らかになされていなかった。

2. 研究の目的

計算機技術の発展とともに第一原理計算に基づく転位の計算が可能になり、これまで説明がされていない強化と軟化を特徴付ける機構を明らかにする可能性が広がっている。さらに、これまで経験的な試行錯誤によって行われてきた合金設計に対して、元素の電子状態に基づき包括的に特性を予測する試みが国内外で盛んに行われている。このように、高効率な元素戦略的アプローチが確立されることによって、学術的な重要性のみならず工業的にも材料設計における革新をもたらすことが期待されている。本研究では、BCC 金属の変形の基礎となる転位運動がキンク形成と運動の2つの熱活性化過程によることに注目する。そして、合金元素の転位運動への影響を原子モデルから直接評価し、その結果と熱活性化過程に基づく理論をつなぐ枠組みを開発することによって、温度に依存した複雑な力学挙動を解明する。

3. 研究の方法

BCC 金属では力学特性は合金元素の濃度と温度が関係する複雑な挙動を示すことが知られており、あらゆる条件下で特性を予測することは困難である。本研究の目的は、変形の基礎となる転位運動と合金元素の関係を原子・電子レベルから理解し、BCC 金属の複雑な力学特性を包括的に解明するとともに戦略的な合金設計手法を構築することである。合金元素の転位運動への影響として、FCC 合金では積層欠陥への偏析が電子結合によって生じるという鈴木効果が知られているが、析出強化などと比べて力学特性への影響は小さい。一方、予備研究から BCC 合金では電子結合の影響が力学特性やその濃度や温度依存性に支配的な役割を持つ可能性を示した。BCC 金属ではらせん転位の運動が変形を担っており、らせん転位の運動はキンク形成とキンク移動という2つの熱活性化過程によって支配される。そのため、合金元素の電子状態の性質が熱活性化過程に影響を及ぼすと想定される。ここで、図1に示すように、転位運動の基礎となるキンクの熱活性化過程をモデル化することで、第一原理計算による精密な計算から問

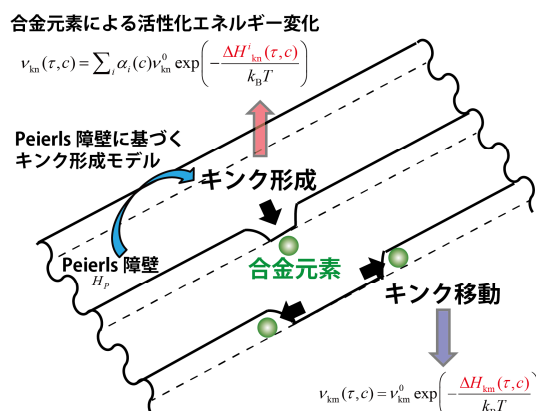


図1 合金中の転位運動の素過程。合金元素の熱活性化過程への影響として記述される。

接的に温度と濃度に依存する力学挙動を評価する．BCC 金属の変形の基礎となるらせん転位は静水圧成分を持たないため，合金元素との相互作用は従来理論である弾性相互作用に基づく機構に対して，マトリクスと合金元素の電子間相互作用が支配的な役割を果たすと予測される．

4．研究成果

【第一原理計算に基づく転位芯構造解析】

次に，合金元素の役割を理解するために，タングステン（W）の転位芯構造に対する第一原理計算を応用した．第一原理計算の枠組みで転位の計算を行うために，転位構造のモデルは線形弾性論を用いた変位場を与えた周期境界中の四重極子配置を考え， $b = a_0 / 2 \langle 111 \rangle$ の Burgers ベクトルをもつらせん転位を導入する．第一原理計算を用いて任意の位置のエネルギーを計算した結果を図 2 に示す．ここで，Differential displacement（DD）ベクトルを用いたらせん転位の局所的な変位から転位芯構造を可視化している．BCC におけるらせん転位の最安定の転位芯は Easy core と呼ばれる状態であり，Split core と Hard core でそれぞれ極大点を取り，Split core で最大となる．二つの Easy core を結ぶ最小エネルギー経路を朱色の線で示しており，Split core と Hard core の間の鞍点が Peierls ポテンシャルに相当する．以上のように，第一原理計算を用いて転位構造および，転位運動のエネルギー障壁を解析する枠組みを構築した．

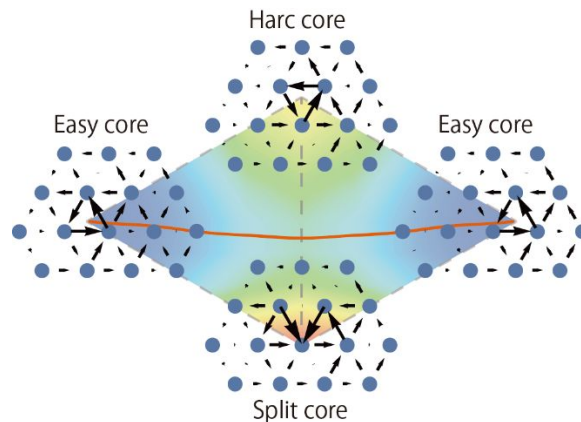


図 2 らせん転位の 2 次元運動のエネルギープロファイルと遷移状態の転位芯構造．

【合金元素によるマクロな力学特性】

合金化によるマクロな力学特性は，合金元素が転位芯構造や運動にどのように影響するのかを評価することによって理解することができる．最も基礎的な特性として，合金元素が存在する際の転位芯との相互作用と前述の鞍点のエネルギーがどのように変化するかを検討した．図 3 に W のらせん転位近傍に第 6 周期の遷移金属が存在する際の，転位と合金元素の相互作用エネルギーと鞍点のエネルギー変化を示す．図 3(a)から，相互作用エネルギーは， $5d$ 電子の状態の変化によって大きく，かつ系統的に変化することがわかる．具体的に， d 電子の少ない Hf, Ta は相互作用が非常に小さく， d 電子の多い元素では強い引力相互作用を持つ．また，この引力相互作用によって，図 3(b)の転位運動の Peierls ポテンシャルは低下することが確認される．負の値は引力相互作用が Peierls 障壁より大きくなり，転位と合金元素が自発的に吸着することに対応している．

前述のように BCC 合金のらせん転位の運動は熱活性化過程であることを考慮して、マクロな力学特性と関連付けることができる。第一原理計算による活性化エネルギーに関する基礎的な特性を用いて、合金元素の例として Re 濃度を変化させた際の温度と CRSS の関係を図 4 に示した。図から、古典的な強化理論では考慮することが困難な、濃度と温度によって複雑に変化する CRSS を再現できることが確認できる。なお、合金元素の原子半径差が小さいにもかかわらず、元素の違いによって系統的な変化を生じるのは、BCC 金属の転位と合金元素は力学的な相互

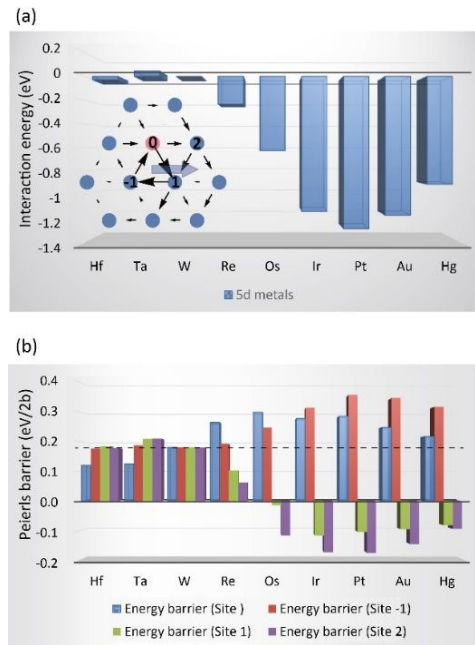


図 3 第一原理計算による転位と合金元素の関係。(a)相互作用エネルギーと(b)転位運動のエネルギー障壁。

作用に比べて電子の結合による影響が支配的であるためであると考えられる。このような化学的な相互作用は、古典的な強化理論では考慮することができないため、BCC 合金の力学特性の理解にはとりわけ、電子結合を考慮した議論が必要であることを示唆している。これは、逆に言えば、基礎的な特性を電子論的解析によって評価することで、合金化によるマクロな力学特性を予測することが可能であることを示している。

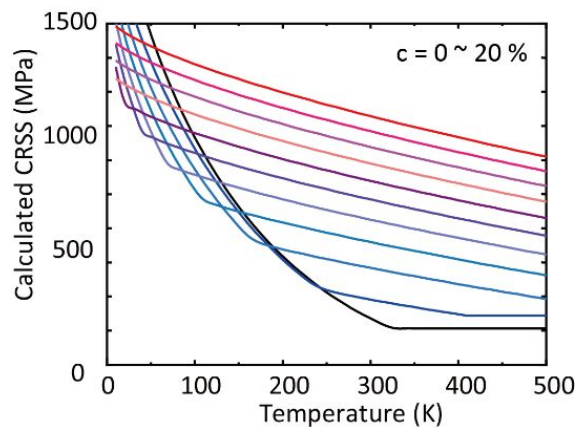


図 4 転位運動の熱活性化過程に基づく CRSS の評価。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計21件（うち査読付論文 21件／うち国際共著 5件／うちオープンアクセス 3件）

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Suzudo T., Tsuru T. | 4. 巻 11 |
| 2. 論文標題 Inclination of self-interstitial dumbbells in molybdenum and tungsten: A first-principles study | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 AIP Advances | 6. 最初と最後の頁 065012 ~ 065012 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0048740 | 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 Yamaguchi Masatake, Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito, Ebihara Ken-ichi | 4. 巻 62 |
| 2. 論文標題 Hydrogen-Trapping Energy in Screw and Edge Dislocations in Aluminum: First-Principles Calculations | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS | 6. 最初と最後の頁 582 ~ 589 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2020375 | 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 Gilbert M.R., Arakawa K., Suzudo T., Trelewicz J.R., Tsuru T., et al. | 4. 巻 554 |
| 2. 論文標題 Perspectives on multiscale modelling and experiments to accelerate materials development for fusion | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Nuclear Materials | 6. 最初と最後の頁 153113 ~ 153113 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jnucmat.2021.153113 | 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 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 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 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 Kurihara Kensuke, Lobzenko Ivan, Tsuru Tomohito, Serizawa Ai | 4. 巻 72 |
| 2. 論文標題 Effects of local bonding between solute atoms and vacancy on formation of nanoclusters in Al-Mg-Si alloys | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Japan Institute of Light Metals | 6. 最初と最後の頁 47 ~ 53 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2464/jilm.72.47 | 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 1998 |
| 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 H. Somekawa, D. A. Basha, A. Singh, T. Tsuru, M. Yamaguchi | 4. 巻 61 |
| 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 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.mtm2020040 | 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, 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 オープンアクセスとしている (また、その予定である) | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名 A. Bendo, K. Matsuda, K. Nishimura, N. Nunomura, T. Tsuchiya, Seungwon Lee, Calin D. Marioara, Tomohito Tsuru, Masatake Yamaguchi, Kazuyuki Shimizu, Hiroyuki 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 オープンアクセスとしている (また、その予定である) | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名 M. Yamaguchi, T. Tsuru, K. Ebihara, M. Itakura, K. Matsuda, K. Shimizu, H. Toda | 4. 巻 61 |
| 2. 論文標題 Hydrogen Trapping in Mg ₂ Si and Al ₇ FeCu ₂ Intermetallic Compounds in Aluminum Alloy | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS | 6. 最初と最後の頁 1907-1911 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.mtm2020201 | 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 |
| 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 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.mtm2020263 | 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 戸田裕之, 山口正剛, 都留智仁, 清水一行, 松田健二, 平山恭介 | 4. 巻 60 |
| 2. 論文標題 ナノ~マクロを繋ぐトモグラフィー : 界面の半自発的剥離 | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 まてりあ | 6. 最初と最後の頁 13-18 |
| 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 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 2020年 |
| 3. 雑誌名 まてりあ | 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) 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 Tsuru Tomohito, Wakeda Masato, Suzudo Tomoaki, Itakura Mitsuhiro, Ogata Shigenobu | 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 2020年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 025101 ~ 025101 |
| 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 都留智仁 | 4. 巻 7 |
| 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 78 ~ 81 |
| 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 山本晶太・宮嶋陽司・渡邊千尋・門前亮一・都留智仁・三浦博己 | 4. 巻 83 |
| 2. 論文標題 多軸鍛造加工を施した工業用純チタンの変形挙動の結晶粒径依存性とひずみ速度依存性 | 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 465-473 |
| 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 Bendo Artenis, Matsuda Kenji, Lervik Adrian, Tsuru Tomohito, Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Holmestad Randi, Marioara Calin D., Shimizu Kazuyuki, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake | 4. 巻 158 |
| 2. 論文標題 An unreported precipitate orientation relationship in Al-Zn-Mg based alloys | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Materials Characterization | 6. 最初と最後の頁 109958 ~ 109958 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matchar.2019.109958 | 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 Yang Ping-Jiong, Li Qing-Jie, Tsuru Tomohito, Ogata Shigenobu, Zhang Jie-Wen, Sheng Hong-Wei, Shan Zhi-Wei, Sha Gang, Han Wei-Zhong, Li Ju, Ma Evan | 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 |

〔学会発表〕 計34件 (うち招待講演 16件 / うち国際学会 8件)

| |
|--|
| 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 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 / 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 |
| 2. 発表標題 欠陥ダイナミクスに基づく力学機能評価: 複雑な合金系への応用 |
| 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 都留智仁, イバンロブゼンコ, 韓恕, 陳正昊, 岸田恭輔, 乾晴行 |
| 2. 発表標題 BCC-MEAモデル合金を用いた第4族元素の力学特性への影響 |
| 3. 学会等名 金属学会2022年春季(第170回)講演大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 鈴木知明, 海老原健一, 都留智仁, 森英喜 |
| 2. 発表標題 機械学習ポテンシャルを用いたBCC鉄における破壊の分子動力学シミュレーション |
| 3. 学会等名 金属学会2022年春季(第170回)講演大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 鈴木知明, 都留智仁 |
| 2. 発表標題 MoおよびWのダンベル型SIAの傾斜に関する第一原理計算 |
| 3. 学会等名 日本金属学会2021年秋季(第169回)講演大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 橋本直幸, 上田幹人, 林重成, 岡弘, 磯部繁人, 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作製(1)全体概要 |
| 3. 学会等名 日本原子力学会2021年秋の大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 T. Tsuru |
| 2. 発表標題 Effect of local atomic disorder on dislocation core in BCC high entropy alloys |
| 3. 学会等名 Thermec ' 2021 (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 T. Tsuru |
| 2. 発表標題 Numerical description of screw dislocation in dilute and highly-concentrated BCC alloys |
| 3. 学会等名 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2020+1) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H. Toda |
| 2. 発表標題 Hydrogen-accelerated cleavage in high strength aluminium alloys |
| 3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 H. Toda, M. Yamaguchi, T. Tsuru, K. Shimizu, K. Hirayama, K. Ebihara, K. Matsuda |
| 2. 発表標題 Hydrogen embrittlement mechanism of Al-Zn-Mg alloys: semi-spontaneous interfacial decohesion |
| 3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 M. Yamaguchi, T. Tsuru, K. Ebihara, M. Itakura |
| 2. 発表標題 Hydrogen Trapping Energy at Incoherent Boundary in Aluminum Alloy: First-Principles Calculations |
| 3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 I. Lobzenko, T. Tsuru |
| 2. 発表標題 First-principles modeling of BCC to omega phase transition in ZrNbTaTiHf high-entropy alloy |
| 3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 I. Lobzenko, T. Tsuru |
| 2. 発表標題 Short-range order influence on the quality of interatomic potential built using machine learning technique for quinary high entropy alloys |
| 3. 学会等名 2nd World Congress on High Entropy Alloys (HEA 2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Tomohito Tsuru |
| 2. 発表標題 First-principles calculations of dislocation core structure in BCC-HEAs |
| 3. 学会等名 Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (国際学会) |
| 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解析 |
| 3. 学会等名 金属学会2020年秋期（第167回）講演大会（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 戸田裕之、山口正剛、都留智仁、清水一行、藤原比呂、平山恭介、松田健二 |
| 2. 発表標題 ヘテロ構造制御によるアルミニウム合金の力学特性向上の試み |
| 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、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 金属学会2021年春期（第168回）講演大会（招待講演） |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 都留智仁, Ivan Lobzenko, 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 strengthductility 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 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 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(京都大学吉田キャンパス)(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(東北大学片平キャンパス)(招待講演) |
| 4. 発表年 2020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(名古屋大学)(招待講演) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Tomohito 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 都留智仁 |
| 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 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 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. 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（招待講演） |
| 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） |
| 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 |
| 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 |
| 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 fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics |
| 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 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 |

〔図書〕 計2件

| | |
|---|-----------------|
| 1. 著者名 I. Tanaka, N. Tsuji, H. Inui, (T. Tsuru Part II 4) | 4. 発行年 2022年 |
| 2. 出版社 Springer | 5. 総ページ数 286 |
| 3. 書名 The Plaston Concept: Plastic Deformation in Structural Materials | |

| | |
|----------------------------|-----------------|
| 1. 著者名 乾晴行, 分担執筆 都留智仁 他 | 4. 発行年 2020年 |
| 2. 出版社 内田老鶴圃 | 5. 総ページ数 296 |
| 3. 書名 ハイエントロピー合金 | |

〔産業財産権〕

〔その他〕

| |
|---|
| Researchmap https://researchmap.jp/tsurutomohito 照射材料工学研究グループHP https://nsec.jaea.go.jp/fme/group5/group5_index.htm |
|---|

6. 研究組織

| 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|---------------------------|-----------------------|----|
|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| | |
|---------|---------|
| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|