戦略的創造研究推進事業　CREST
研究領域「シミュレーション技術の革新と
実用化基盤の構築」
研究課題「材料の組織・特性設計統合化システム
の開発」

研究終了報告書

研究期間　平成15年10月～平成21年3月

研究代表者：石田　清仁
（東北大学大学院工学研究科　教授）

§1 研究実施の概要

1. 基本構想

各種の先進機能材料および構造材料の持つ諸特性は、その内部組織に大きな影響を受ける事から、その機能を最大限に引き出すにはそのための組織の制御が不可欠である。ナノからマイクロスケールに至る一連の内部組織を制御するための基本情報は状態図（相図）であるが、1980年代から著しい進展を遂げた第一原理的計算手法や実用材料をターゲットとするCALPHAD (Calculation of Phase Diagrams)法に代表される現象論的な計算手法の発展によって、単に状態図の予測や計算だけでなく、現在、組織形成を左右する自由エネルギーを定量的に推定できるようになっている。この様な進展により各方面の素材メーカーが状態図や熱力学のソフトウェアを導入して、現在日常的に研究開発に利用しており、そのレベルの高さは欧米をしのいで現在日本がトップレベルの状況にある。しかしこれらのソフトウェアの大部分は平衡計算すなわち“スタティック”な扱いであり、企業側からは速度論的な取り扱い、すなわち“ダイナミクス”へのソフトウェアの開発の要望が極めて大きい。これは実際の実用合金が必ずしも平衡状態にない事に起因する。従って、現在国内外の製造業にて求められているのは“スタティクスからダイナミクス”へわたる統合化された材料設計システムの開発である。平衡計算や速度論的計算については各々個々に多くの研究グループがあるが、両者を組み入れて統合化する研究は個人研究では限界があるため、ほとんど行なわれていないのが現状である。したがって、本研究の課題を遂行するためには、個々の成果を材料設計ツールの開発へと集積するチーム型研究が不可欠である。さらに重要なことはこれらのシミュレーションは、研究のためのツールとなるだけではなく実際の材料開発に直接役立

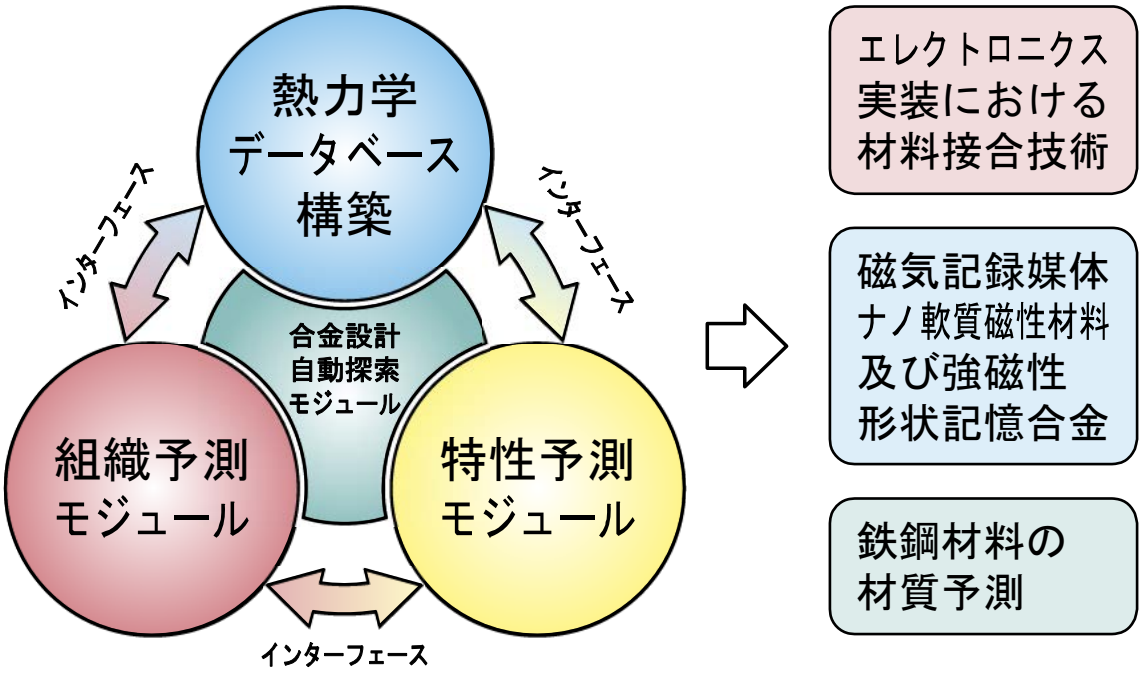


図1 プロジェクトの概要と研究対象

つものでなければならない事である。本研究グループはこれまでシミュレーション技術に携わっているばかりでなく、それを応用した実際の材料開発を実現している研究グループでもある。従って単なるシミュレーション技術の開発だけでなく、それを利用して実際に材料開発まで行い、世界にシミュレーション手法の有用性を示す事が出来て初めて、実用化基盤の構築が出来ると考えている。本研究は、この様に実用合金開発に直結するシミュレーション技術の開発を目指し、共同でこの課題に挑戦するものである。そのために本研究では、熱力学データベース構築を目指す東北大学と九州工業大学、組織シミュレーションを行なう(独)物質・材料研究機構、磁気記録媒体材料の合金設計を行なう(独)産業総合研究所(研究開始時、後に東北大学)、熱力学データベースを販売・開発している(株)材料設計技術研究所、さらに第一原理から CALPHAD、Phase field 法等各種シミュレーションを種々の材料開発にすでに適用している(株)豊田中央研究所及びJFEスチール(株)が参画し、産学官による統合化システムの共同開発を行なうものである。

2. 研究の内容

(1)研究内容

本研究で最終目標とするのは図1に示す様に、汎用的な "材料の組織と特性を予測" する統合化システムの開発と、合金組成自動探索システムの開発である。このための汎用プログラムはすぐには作製できないので、社会的ニーズが大きくかつシミュレーションするためのデータベースや基本パラメータが整備されている具体的なターゲットに的を絞って研究を行った。即ち具体的な研究対象として(ⅰ)エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション(ⅱ)磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料及び強磁性形状記憶合金のシミュレーション(ⅲ)鉄鋼材料の材質予測シミュレーションである。研究遂行に当たっては、熱力学データベース構築のための化学自由エネルギーと、組織予測を行なうための組織自由エネルギーの推定、さらに特性評価をシミュレートする必要があるが、図2に研究の全体像を示した。

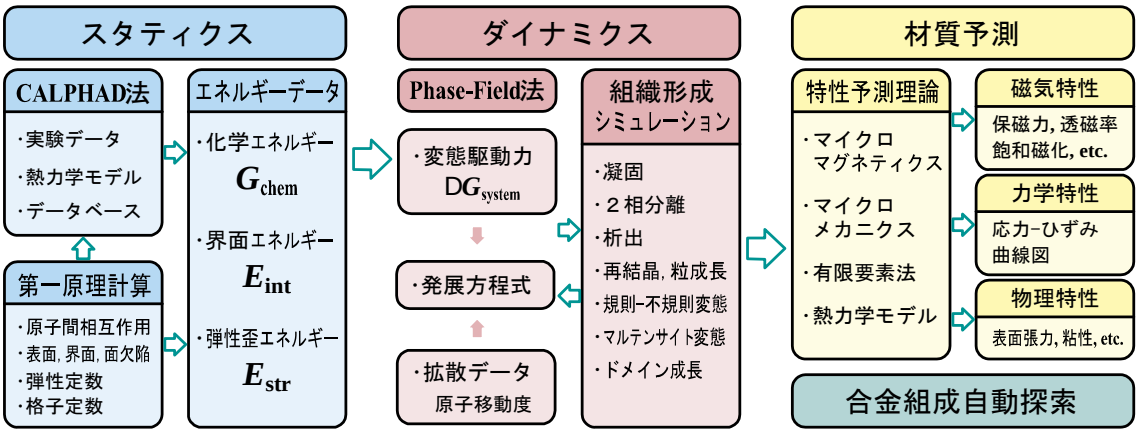


図2 シミュレーションの内容

3. 研究成果

各研究項目に対する成果を次表にまとめて示す。

対象	項目	内容	状況
エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション	接合材料の熱力学データベース構築	低温及び中温用 Pb フリーはんだ Al-Ag-Bi-Cu-In-Pb-Sb-Sn-Zn	既に商品化 更に Ni と Au を追加し、商品化を目指す
		高温用 Zn-Al 基はんだ Zn-Al-Ag-Bi-Cu-Mg-Sn	ほぼ構築
	Cu 基板材料の熱力学データベース構築	Cu-B-C-Cr-Fe-Ni-P-Si-Sn-Ti-Zn	既に商品化 更に Mg と Zr を追加したデータベース構築を目指す
	合金組成自動検索システム	設定した融点を示す組成を自動検索	四元系まで完成
	Phase field 法による組織形成シミュレーション	Sn-Bi 系、Sn-Ag-Cu 系、Pb フリーはんだ	完成
磁性材料のシミュレーション	磁気記録媒体の組織形成予測シミュレーション	Co-Cr, Co-Mo, Co-W, FePt-Al_2O_3 ,Co-Cr-Pt- SiO_2	完成
	磁気的性質予測シミュレーション	現用薄膜 Co-Cr-Pt- SiO_2	完成 他の系への拡張を行う
	ナノ軟質磁性材料熱力学データベース構築	Fe-B-Si-Cu-Co-Nb-Zr	完成
	強磁性形状記憶合金の組織形成シミュレーション	Ni-Mn-Ga 系の組織の磁場依存	完成 他の Ni-Mn 基合金への適用を検討中
鉄鋼材料のシミュレーション	Fe 中の硼化物の熱力学データベース構築	Fe-B-Si-Co-Cr-Mo-Nb Ni-Ti	ほぼ構築
	Fe 中の硫化物の熱力学データベース構築	Fe-S-C-N-Cr-Mn-Ni-Ti	既に商品化 Cu,Nb,V を追加したデータベース構築を目指す
	中炭素鋼鍛造品の相変態予測シミュレーション	鍛造後の初析フェライト、パーライト、ベイナイト変態を計算予測するモデルとプログラム	モデル構築ほぼ完了、CALPHAD 連携プログラム開発済
	鉄鋼中の炭化物の組織形成シミュレーション	Fe-C 系 Fe-C-X 系	2元系シミュレーション完成、3元系研究中
機械的特性のシミュレーション	均質化法に基づくマルチスケール解析手法によるシミュレーション	2相鋼の応力-歪み曲線や成形性能予測	マルチスケール解析プリ・ポスト処理システムを開発中
材料組織形成計算統合化システム	Phase field 法を主体として組織形成シミュレーション	スピノーダル、強磁性材料結晶粒成長、相分解など様々な合金の組織形成プログラム	Version1 完成 コンテンツ拡張版(Version2)を開発中

§2 研究構想及び実施体制

(1) 研究構想

本研究プロジェクトは、具体的な研究対象として(ⅰ)エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション(ⅱ)磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料及び強磁性形状記憶合金のシミュレーション(ⅲ)鉄鋼材料の材質予測シミュレーションを行うが、具体的内容と役割について図3に示す。

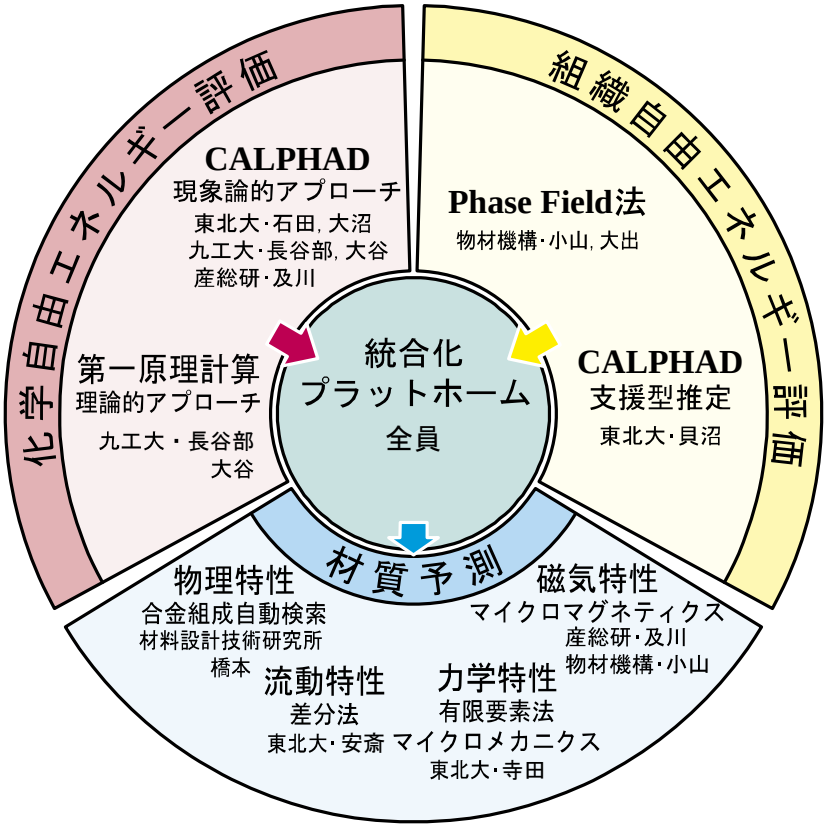


図3 研究内容と参加者の役割

(A)エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション

半導体デバイスにおける接合材料として、Pb フリーはんだの開発が求められているので、計算によって融点、表面張力、粘性などの熱力学的性質を予測するデータベースが求められる。研究開始時にはすでに、Pb、Bi、Sn、Sb、Ag、Cu、Zn、In の8元素についてはほぼ完了していたが、接合基板との反応などに重要な Al、Au 及び Ni をデータベースに追加するための解析を行った。その後 Pb フリー高温はんだのニーズが高まっているので、その有力候補である Zn-Al 系を基本としたデータベース構築についても追加して研究を行った。また目的とする融点や液相と固相の2相温度領域を有する合金組成を自動的に計算するプログラム開発を行った。一方、はんだ接合は通常 Cu 基合金の基板上で行われるので、Cu 基合金の熱力学データベース構築も工業的に重要である。Cu、Ni、Cr、Si、Zn、Fe、Sn、Ti、B、C の10元系以上のデータベース構築を目指した。

(B)磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料及び強磁性形状記憶合金のシミュレーション

Co 基磁気記録媒体の熱力学的データベース構築と組織シミュレーションを行うが、状態図計算で予測される Co-Mo 系と Co-W 系の磁気誘起2相分離を利用した磁気記録媒体開発の一環として、Co-(Mo、W)系の熱力学解析と組織シミュレーションを行うとともに、実際に薄膜を作成しシミュレーションとの比較を行い新しい磁気記録媒体の開発を目指した。また、Co-W 系の状態図研究を遂行している過程で、Co 基の3元系合金の中で $L1_2$構造の3元化合物が出現し、耐熱合金として極めて有望である事が確認された。そこでこの耐熱 Co 基合金の基本系である Co-Al-W 基合金の熱力学データベース構築やフェイズフィールドによる組織変化についてのシミュレーションにも着手した。一方ナノ軟質磁性材料については、Fe 基系の熱力学データベース構築を行っているが、Fe-B-Si-Cu-Co-Nb-Zr 系の計算が出来るシステムを構築するためまだ未解析である Fe-B-X、B-X-Y3元系を中心に行った。一方、強磁性形状記憶合金については、本研究で発見したメタ磁性形状記憶特性を有する Ni-Mn-X(X:Sn,In,Sb)系熱力学解析とマルテンサイト変態さらに磁気的性質についてシミュレーション作成方法を検討した。

(C)鉄鋼材料の材質予測シミュレーション

組織シミュレーションに不可欠な熱力学データベースについては、これまでかなりの蓄積データがあるので、昨年度に引き続き商品化を行うべくその作業を行った。具体的には、ボロンを含むマイクロアロイング鋼として Fe-C-B-Cr-Ni-Co-Ti 系、硫黄を含むマイクロアロイング鋼として Fe-C-S-Mn-Ni-Cr-Ti- Cu-Nb-V 系炭素と窒素を含む系として Fe-C-N-Cr-Mn- Ni-Ti-Nb-V 系の3種類のバージョンである。またこれらのデータベースを結合する事を目指すが、そのために必要な具体的な2元系、3元系の解析を地道に行う必要がある。またフェーズフィールド法によってフェライト、パーライト及びベイナイトの組織形成のシミュレーションを行った。さらに有限要素法を用いた均質化法によって各種組織の機械的性質を予測するシミュレーションを行った。

(2)実施体制

○ｸﾞﾙｰﾌﾟﾘｰﾀﾞｰ

グループ名	研究代表者又は 主たる共同研究者氏名	所属機関・部署・役職名	研究題目
東北大学グループ	○石田 清仁 安斎 浩一 貝沼 亮介 及川 勝成(旧産総研) 大沼 郁雄 寺田賢二郎	東北大学・工学研究科・教授 東北大学・工学研究科・教授 東北大学・多元物質科学研究所・教授 東北大学・工学研究科・准教授 東北大学・工学研究科・准教授 東北大学・工学研究科・准教授	熱力学データベース構築 はんだの流動シミュレーション 強磁性形状記憶合金の実験 磁気記録媒体及び鉄鋼シミュレーション 熱力学データベース構築 均質化法による機械的性質シミュレーション
(独)物質・材料研究機構グループ	○小野寺秀博 小山 敏幸	(独)物質・材料研究機構・計算科学センター・ｸﾞﾙｰﾌﾟﾘｰﾀﾞｰ (独)物質・材料研究機構・計算科学センター・主幹研究員	(1)Phase-field 法による組織形成過程のモデル化及び組織・特性予測 (2)合金組成自動探索システムの開発
九州工業大学グループ	○長谷部光弘 大谷 博司	九州工業大学・工学研究院・教授 九州工業大学・工学研究院・教授	ナノ軟磁性材料およびマイクロアロイング鋼の熱力学データベース構築

㈱豊田中央研究所グループ	○中西　広吉 田中　浩司	㈱豊田中央研究所・材料基盤研究部・金属成形研究室・室長 ㈱豊田中央研究所・材料基盤研究部・金属成形研究室・主任研究員	鉄鋼の相変態シミュレーション
JFEスチール㈱グループ	○長滝　康伸 奥田　金晴	JFEスチール㈱スチール研究所・主任研究員 JFEスチール㈱スチール研究所・主任研究員	Phase Field 法を用いた鋼の炭化物の組織形成に関するシミュレーション技術の確立

§3 研究実施内容及び成果

3.1 エレクトロニクス実装における材料接合シミュレーション（東北大学　石田、大沼グループ）

(1) 研究実施内容及び成果

① 研究のねらい

Pb フリーはんだ合金及びその基板材料である Cu 基合金の熱力学データベースを構築する。はんだ合金は低温及び中温用の Sn ベースと高温用の Zn-Al 基合金を対象とする。またはんだの湯流れについて表面張力を考慮してシミュレーションを行う。さらに接合部分や基板との界面での反応シミュレーションを行う。

② 研究実施方法

実験による相平衡の検討とCALPHAD 法による熱力学パラメータの評価を行う。さらにはんだの湯流れ解析については SOLA-VOF 法の解析アルゴリズムに表面張力を考慮したシミュレーションを行う。

③ 研究成果

(a) 熱力学データベース構築

本研究グループはすでに、Pb、Bi、Sn、Sb、In、Zn、Ag、Cu の8元素の相平衡や熱力学的性質を予測するデータベースを有しているが、これを更に充実させ Al、Au、Ni を含んだデータベース構築がほぼ完成した。また、基板として重要な Cu 基合金については現在 Cu、B、C、Cr、Fe、Ni、P、Si、Sn、Ti、Zn、の11元素のデータベースを構築し商品化している。さらに鉛フリー高温はんだの候補材である Zn-Al 基合金について，Zn-Al-Mg3元共晶反応に及ぼす添加元素の影響を調査し，Zn-Al-Mg 基合金の熱力学解析を行った。本研究では Zn-Al-Mg-X（X：Sn，Bi，Ge）の融点と組織の調査を行い、Mg を置換して添加元素を加えた試料の測定結果を図4に示す。いずれの添加元素の場合も添加量が増えるに従い液相線温度の上昇がみられた。一方、図４上に示した

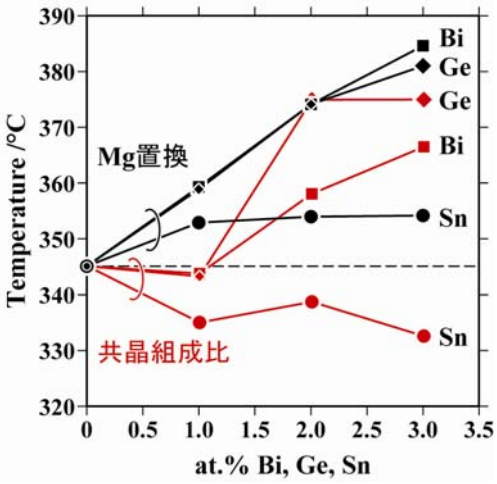


図4　Zn-Al-Mg 共晶温度に及ぼす添加元素の影響

3元共晶組成比合金に第4元素を加えた実験では、Ge、Bi を加えた場合に、液相線温度の上昇が見られたが、Sn を添加した場合に限り液相線温度が低下した。この Zn-Al-Mg-Sn 合金の組成を適切に決めることができれば、さらなる融点の降下が期待できる。そこで Zn-Al-Mg-Sn4元系の熱力学的解析を行った。Zn-Al-Mg-Sn 系状態図を熱力学的に解析するためには各相の自由エネルギーを記述する必要がある。この場合の熱力学モデルとして本研究では多元系への拡張が容易な準正則溶体モデルを用いることにした。なお、Mg_2Sn 等の化合物相は化学量論化合物と仮定し。自由エネルギーを記述した。Zn、Al、Mg、Sn の4元素より構成される6種の2元系と4種の3元系に関する熱力学パラメータを評価して、Zn-Al-Mg-n 系合金の熱力学データベースを構築した。Zn-Al-Mg-Sn の 1at.%Sn、3at.%Sn の液相面の計算結果を参照して、融点が最も下がると期待される断面の試料を作製した、その試料について DSC 測定を行い、実験値と計算結果を比較する。1at.%Sn の液相面の計算結果を図5(a)に示す。最も融点が低い合金は 83Zn-7Al-9Mg（at.%）の組成で、融点が 332°C と推定できる。そこで 83at.%Zn の縦断面の試料（83Zn-1Sn-(16-x)Al-xMg: x=6, 7, 7.5, 8, 9, 10）を作製し DSC による熱分析を行った。 図5(c)は Zn-1.0Sn-5.0Mg-12.0Al（at.%）の試料中によく見られた凝固組織、図5(e)は Zn-1.0Sn-9.0Mg-8.0Al（at.%）の試料中によく見られた凝固組織である。EDX による組成分析の結果から、図5(c)では Zn と Al から成る fcc 相が初晶として晶出した後，hcp 相が凝固している。一方，図5(e)の初晶は Zn_2Mg（σ）であることが判明した。これらの初晶の違いは計算結果と一致する。また、図５(d)は融点が最も低下した Zn-1.0Sn-7.5Mg-10.5Al の試料の凝固組織であり、前の二つと異なり粗大な初晶が見られないことから、溶融範囲が狭く共晶合金に近いものと考えられる。DSC の測定結果を計算状態図上に示したのが図5(b)である．計算値と実験値を比較すると融点や不変系温度が凡そ一致している事がわかる。以上より、熱力学データベースを利用することにより、合金設計と組織予測が効率良く行うことができる。3at.%Sn 合金についても，同様に状態図を計算した結果、Zn-3.0Sn-8.0Mg-9.0Al の組成で融点が 332.4°C まで低下することが予測され，実験結果とも凡そ一致する。以上の結果に基づき、Pb フリー高温はんだの候補として期待される Zn 基の Zn-AL-Ag-Bi-Cu-Mg-Sn 系のデータベース構築を行い、ほぼ完成する事が出来た。

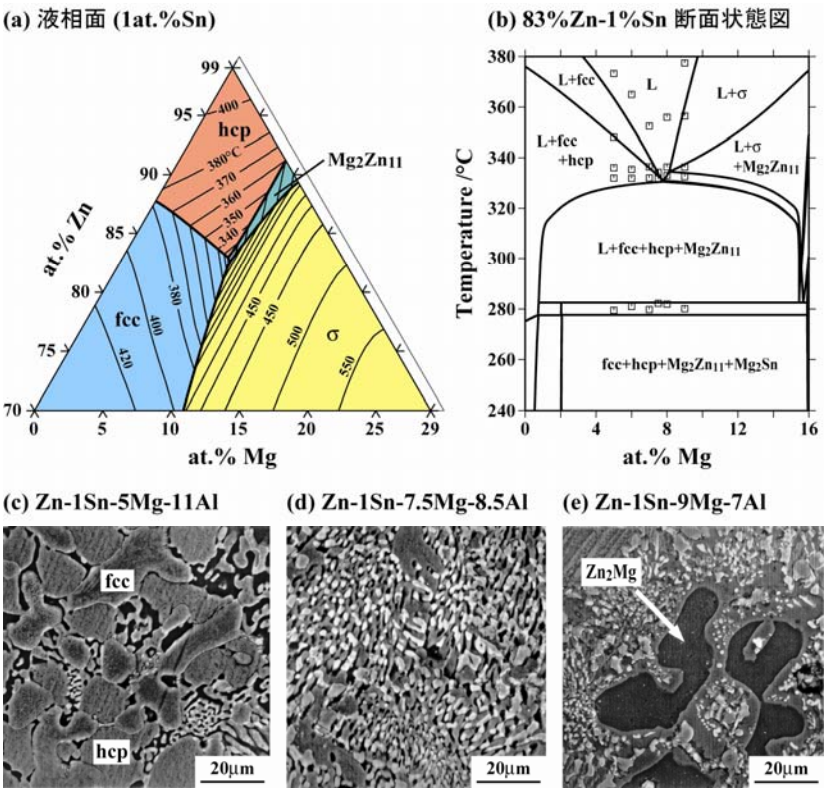


図5 (a)Zn-Al-Mg-Sn4元系計算状態図, (b)と(c)亜共晶, (d)共晶, (e)過共晶凝固組織

(b) Pb フリーはんだの流動シミュレーション（東北大学　安斎グループ）

Pb フリーはんだの流動シミュレーションについては、まず水モデル実験の結果とシミュレーション結果を比較したところ、水の流速増加に伴う流れの様子の変化として、表面張力支配の流れから慣性力支配の流れへの遷移をシミュレーションで良く再現できた。そこではんだの場合についても流れシミュレーションを行ったところ、水も出るの場合と同様に表面張力支配の流れから慣性力支配の流れへと変化した。こうした実験結果は、表面張力と慣性力の比から求められる無次元元数、つまりウェーバー数で整理すると良いことがわかった。表面張力が考慮できる 2 次元湯流れシミュレーションプログラムを試作し、その性能を実験により評価した結果、試作プログラムによる計算結果は実験結果と良く一致した。計算例を図6に示す。

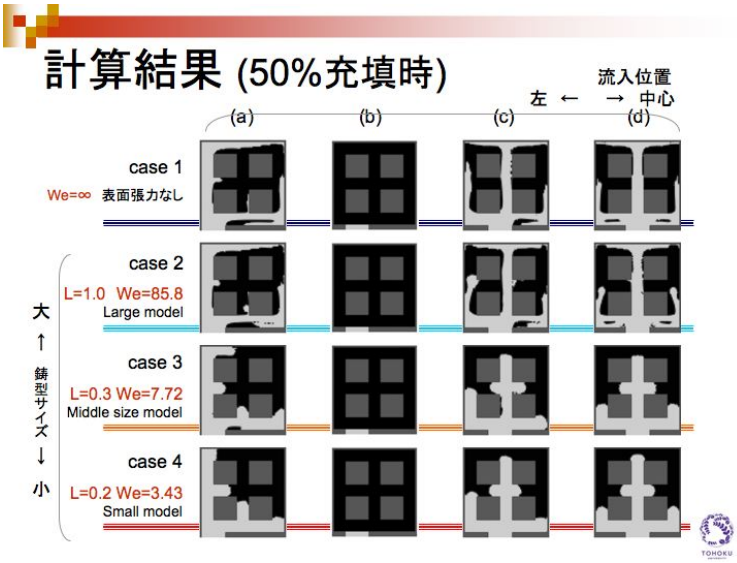


図6　格子状キャビティ内の湯流れ挙動

(c) Pb フリーはんだと Cu 基板との反応シミュレーション（東北大学　石田、大沼グループ）

鉛フリーはんだと Cu 合金のデータベースと他のソフトウェアを組み合わせる事により界面反応のシミュレーションが可能となった。一例として、Sn ベースはんだを Cu 基板にはんだ付けした場合に Cu の溶出挙動（図7）と基板とはんだとの間に形成される金属間化合物の成長シミュレーションを比較した結果を図8に示す。

(2) 研究成果の今後期待される効果

エレクトロニクスの接合技術で本研究が行ったマイクロソルダー材のデータベース構築は、高い評価を得て、国内外の企業、大学で利用されており、今後さらに拡大すると考えられる。特に本研

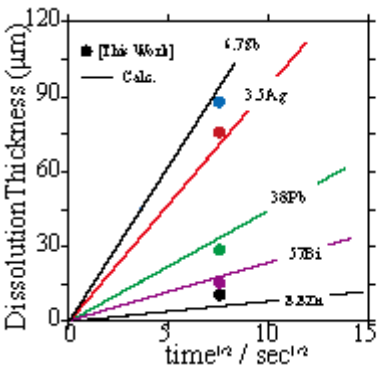


図7　Cu 基板をはんだ付けした時の 300℃における Cu の溶出挙動

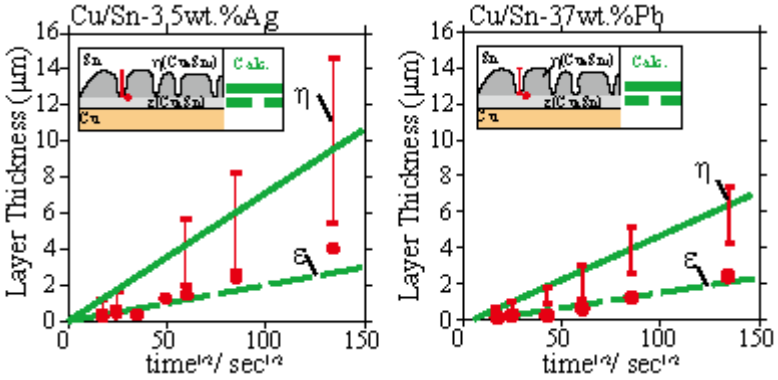


図8　Cu とはんだとの界面で成長する金属間化合物の挙動
左図 Sn-3.5%Ag 合金、右図 Sn-37%Pb 合金

究で提案した高温用 Pb フリーはんだの候補である Zn-Al 基系は、ヨーロッパで新しいプロジェクトで今年よりスタートしており、本研究は先駆的成果として評価されており、今後ヨーロッパを中心に更に研究が進展する事が期待される。一方、Cu 基合金の熱力学データベースについても、これまだ全く存在しなかったので、海外からの問い合わせも多く、今後国内外での利用が拡大するものと期待できる。

3．2 磁性材料（磁気記録媒体）のシミュレーション（東北大学 及川、グループ）

(1) 研究実施内容及び成果

(a) 磁気記録媒体

① 研究のねらい

ハードディスクなどの大容量磁気記録装置に用いられてる CoCr 基スパッタ薄膜は、Co リッチな強磁性相を Cr リッチな常磁性相が取り囲む2相分離組織となっていることが優れた磁気記録特性を示す原因となっていた。近年，超高密度化のための結晶粒微細化により熱揺らぎによる記録特性劣化の問題が顕在化し、FePt-L10 薄膜などのより磁気異方性の高い材料の探索が行われている。しかし、これらの材料は保磁力が高すぎるため現行のヘッド材料での書き込みが困難になるなどの問題点があり，hcp-Co をベースとした高磁気異方性材料の開発も望まれている。本研究では、CoCr 系よりも磁気異方性エネルギーが高く、CoCr 系と同様な2相分離を有する合金探索をするための熱力学データベースの構築とその薄膜物性の検討を行う。

② 研究実施方法

Co 基合金の磁気変態に沿った2相分離を拡散対法などにより実験的に決定しする。得られた実験データと文献等より取得したデータをコンピュータによる熱力学的解析を行い、対象となる合金系の熱力学パラメータを決定する。また、磁気記録媒体として有望と考えられる系の薄膜を実際に作製し、そのナノ組織および磁気特性の評価を行う。

③ 研究成果

(a) Co 基合金の磁気誘起2相分離

Co-Cr 系合金で見られる磁気誘起2相分離はキュリー点の組成による降下度が大きい系で特異的に現れる現象である。Co-Cr 系と同様にキュリー温度の降下度が大きい Co-Mo および Co-W 系では磁気誘起2相分離の存在が期待できる。そこで，拡散対法によって2相分離の出現について実験を行った。図9は Co/Co-10at%Mo の拡散対の接合界面近傍における組織とその濃度プロファイルを示している。図9(a)中に矢印で示した部分に相界面が観察され、その界面で濃度ギャップが認められた。図10に示した Co/Co-10at%W の拡散対においても Co-Mo 系と同様な組織と濃度ギャップを観察することができた。この濃度ギャップが磁気誘起2相分離境界に相当すると考えられる。熱力学的解析に基づいて行った計算状態図を図11および図12に示す。実験結果は，Co-Mo 及び Co-W2元系のキュリー点に沿って出現する2相分離線と合致する。図13は Co-Cr，Co-Mo，Co-W 系の磁気誘起2相分離の計算結果を示している。いずれも類似のキュリー点に沿った角状の2相分離を有し，その大きさもほぼ同様である。

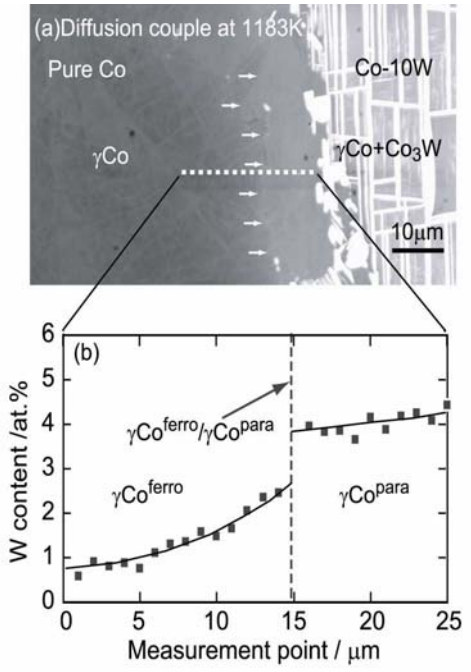


図9 (a) Co/Co-10at%W 拡散対の 1173K における組織
(b) 界面近傍の濃度プロファイル

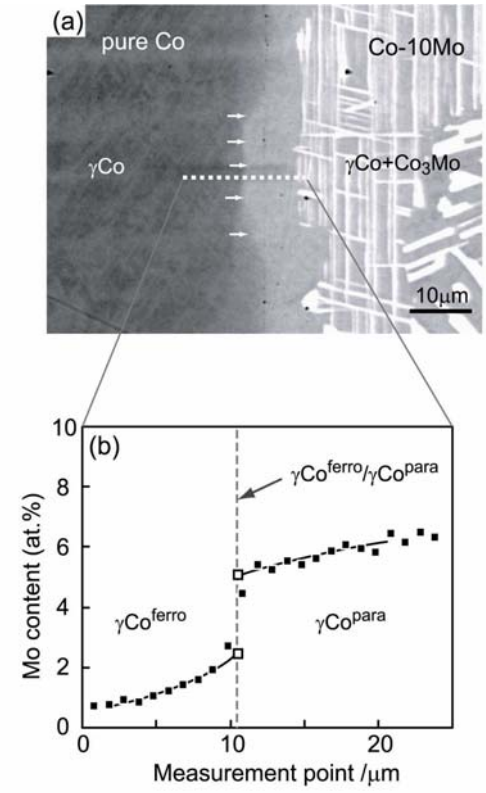
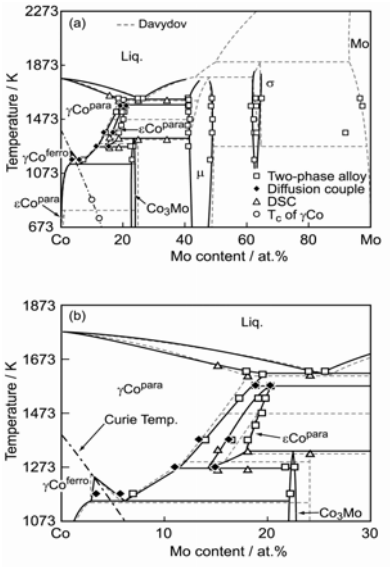
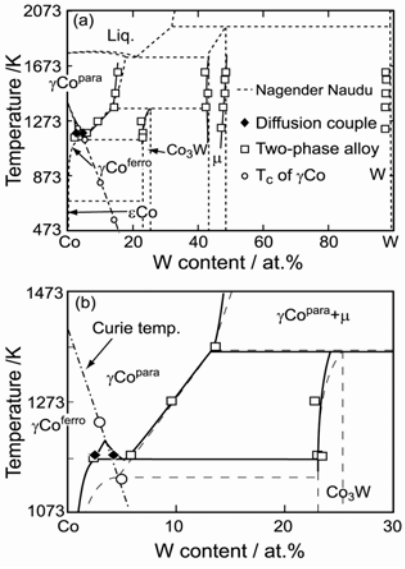


図10 (a) Co/Co-10at%Mo 拡散対の 1173K における組織
(b) 界面近傍の濃度プロファイル





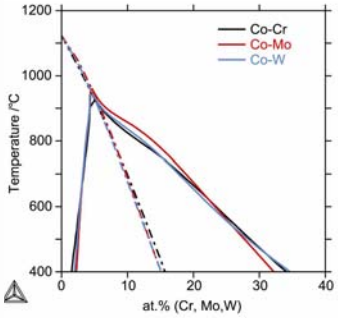


図11 (a) Co-Mo2 元系状態図
(b) Co 側状態図

図12 (a) Co-W2 元系状態図
(b) Co 側状態図

図13 Co-Cr,Co-M-及び Co-W 系
磁気誘起2相分離

(b) Co-W スパッタ薄膜の組織と磁気特性

ここでは，計算状態図より磁気誘起2相分離による自己組織化が期待できる Co-W スパッタ薄膜の組織と磁気特性を中心に報告する。図14は，Co-Cr，Co-Mo，Co-W エピタキシャル膜の結晶磁気異方性定数を Sucksmith-Thompson 法により評価した結果を示している。Co-W 系の磁気異方性定数は Co-Cr 系の6倍程大きな値であり，磁気記録媒体として有望であることを示している。図15は MgO(100)単結晶基板上に NiAlV(50nm)を下地層として Co-16W 合金を 300℃で製膜したときの飽和磁化および保磁力の膜厚依存性を示している。膜厚が薄くなるほど保磁力が増大し、およそ 8mm で最大値を示す。一方、飽和磁化のほうも同様の傾向を示す。このことは、薄い膜ほど2分離が進行しており、膜厚が薄くなるほど、磁化反転機構が磁壁移動から回転機構へと変化していることを示している。また、極薄膜で 1kOe 以上の保磁力を示すことから十分に大きな磁気異方性エネルギーを有していることも推察される。図16(a)は TEM－EDX による Z コントラスト像および図16(a)中に示された点の局所組成分析結果を図16(b)中示している。薄膜内に Mo の組成変調が生じており、低い領域では 10％程度，高い領域では 40-50％程度であり、上記の計算状態図と一致しており、この組成変調は磁気誘起2相分離に基づいていると考えられる。

最近では、磁気記録媒体は hcp 構造の c 軸を記録面に対して垂直に向けた垂直磁気記録媒体となりつつある。そこで，本研究で対象としている CoW 膜についても垂直磁化膜を作製し、その磁気異方性エネルギーに及ぼす下地および Pt 添加の影響について調査した。垂直磁化薄膜は、RuCr 合金を下地層とすることにより得ることができた。図17は、Ru および Ru80Cr20 合金を下地層として Co84W16 合金を 300℃で製膜した垂直磁化薄膜の結晶磁気異方性を示している。Ru を下地とした場合よりもの Ru80Cr20 を下地としたほうが結晶磁気異方性は大きく、かつ膜厚が厚くなっても結晶磁気異方性があまり低下しないことがあきらかとなった。これらの Co84W16 合金薄膜中の格子定数の c/a 比を図18に示す。Ru 下地よりも Ru80Cr20 下地としたほうが c/a の比が小さくなる。このことが大きな結晶磁気異方性の一因と考えられる。この c/a の変化は，下地と垂直磁化膜のミスフィットの影響から来ていると考えられる。今後，組織シミュレーションには，このようなミスフィットの影響等も考慮する必要がある。

図19は CoW 垂直磁化膜に Pt を加えた時の結晶磁気異方性を示している。Pt 濃度が 5.8%の時に 3.5×106erg/cc という非常に大きな結晶磁気異方性が得られることが明らかとなり，CoW 基合金は垂直磁気記録媒体でも，非常に有望であることが明らかとなった。

(2) 研究成果の今後期待される効果

Co 基合金の磁気変態に沿った2相分離に関する熱力学データベースと結晶磁気異方性に及ぼす薄膜構造因子を明らかにすることができた。現在、磁気記録媒体は垂直磁気記録媒体化が進んでおり、結晶粒の微細化と高い結晶磁気異方性が要求されている。今後、シミュレーションによる組織形成機構解析に歪みエネルギーなどを考慮することにより、垂直磁気記録媒体の材料設計を効率的に行うことができるようになると期待される。

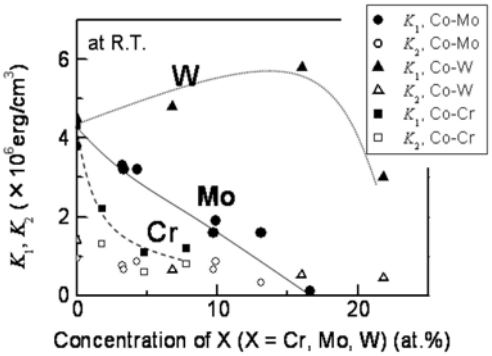


図14 Co-Cr, Co-Mo, Co-W 系 hcp 相の結晶磁気異方性

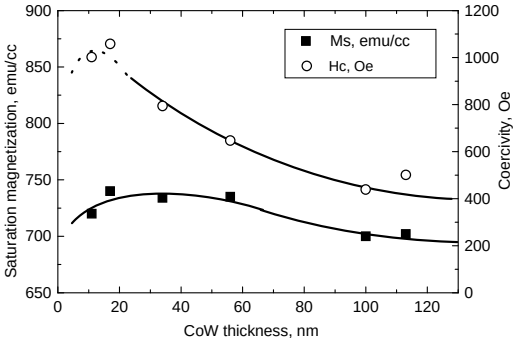


図１５ Co-16at%W 薄膜の飽和磁化および保磁力の膜厚依存性

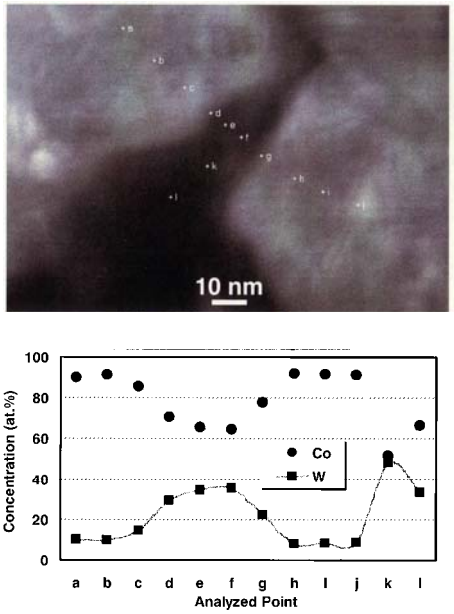


図１６ Co-16W 薄膜の TEM 観察
(a) Z コントラスト像
(b) 組成分析結果

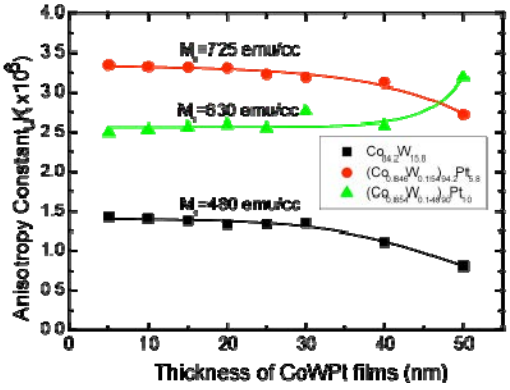


図17 CoW 垂直磁化薄膜の磁気異方性エネルギーに及ぼす Pt 添加およびその膜厚の影響

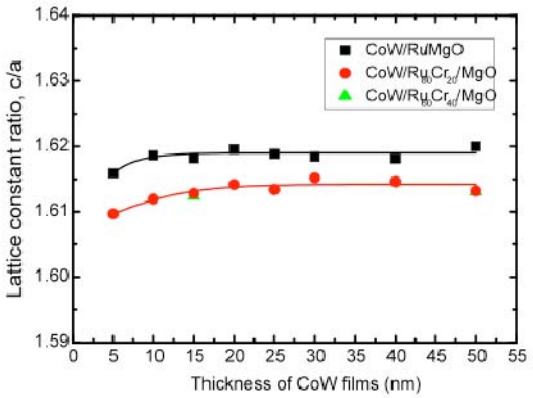


図18　$Co_{84}W_{16}$ 垂直磁化薄膜の格子定数比 c/a に及ぼす下地組成と膜厚の影響

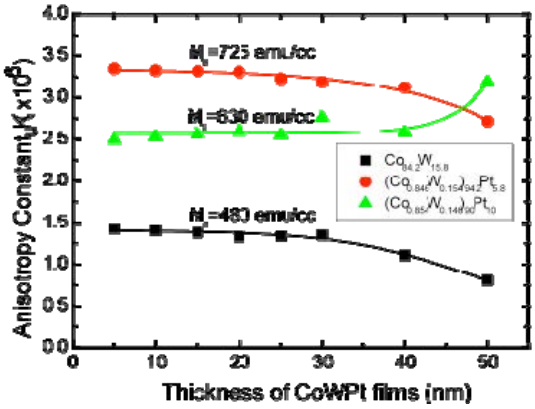


図19　CoW 垂直磁化薄膜の磁気異方性エネルギーに及ぼす Pt 添加およびその膜厚の影響

3．3　磁性形状記憶材料（東北大学　石田、貝沼、及川グループ）

(1)　研究実施内容及び成果

①　研究のねらい

形状記憶合金は、低温で与えた歪を加熱により駆動させる原理である事から、大きな変位と力を発生させるものの、応答性は熱伝導に依存するため限界がある。その様な中で、近年 Ni_2MnGa 合金において強磁性を有する形状記憶合金が見出され、磁場を利用する事による高い応答性を具備しつつも 10%もの磁気誘起歪が得られる事が報告されている。しかし、マルテンサイト相における双晶界面を磁場により移動させる原理による従来の磁性形状記憶は発生応力が高々数 MPa と低いこと、また NiMnGa 合金は単結晶でも非常に脆い事が実用への障害となっている。

本研究では、(1) 近年我々が開発した靭性に富む NiFeGa 強磁性形状記憶合金を中心に、その磁性形状記憶特性に影響を与える磁気特性、結晶構造、組織等の基礎物性を明らかにし、(2) 熱力学データベースの情報を利用して、従来のものとは原理的に全く異なる磁場誘起マルテンサイト変態を生じる合金系の開発を行った。

②　研究実施方法

(a) NiFeGa 系強磁性形状記憶合金

FZ法やマイクロ引下法等の手法を用いて NiFeGa 合金単結晶を作製し、キュリー温度、飽和磁化、結晶磁気異方性エネルギー、磁歪、結晶構造等の基礎物性を熱分析（DSC）、振動型磁力計（VSM）、X線回折（XRD）、キャパシタンス法等を用いて調査した。

(b) NiMnX 系における新型磁性形状記憶合金

状態図計算により安定なホイスラー化合物が存在すると予測された NiMnX 系（X:Al, Si, Ge, In, Sn, Sb）合金を作製し、その磁気特性やマルテンサイト変態の有無を(1)と同様の手法で調査した。

① 研究成果

(a) NiFeGa 基系強磁性形状記憶合金の磁場誘起歪

NiFeGa 合金の磁気変態温度およびマルテンサイト変態温度に関する Fe および Ga 濃度の影響を調査したところ、Fe が多いほど、また Ga が少ないほどキュリー温度も飽和磁化も高いことがわかった。一方、マルテンサイト変態温度は、Fe も Ga も少ないほど高くなる傾向が見られた。この指針に沿ってより高いキュリー温度とマルテンサイト変態温度を有する合金を探索したが、Ga 濃度が 26at%以下では fcc 相との2相域に入るため限界があることが分かった。そこで磁気特性の向上のために Co の添加を行った結果、キュリー温度と磁気異方性を共に高めることが出来た。Co 濃度を 3-6%まで変化させた時の磁化曲線の変化を図20に示す。Co の添加により、磁化容易面と困難軸の磁化曲線によって囲まれる三角形の面積が大きくなり、変態の駆動力である結晶磁気異方性エ

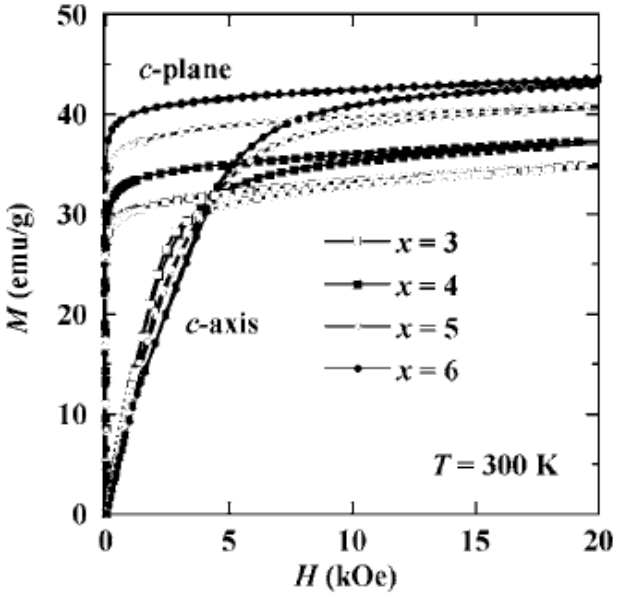


図20 $Ni_{55-x}Fe_{18}Ga_{27}Co_x$(x=3-6)合金の磁化容易面および困難軸での磁化曲線

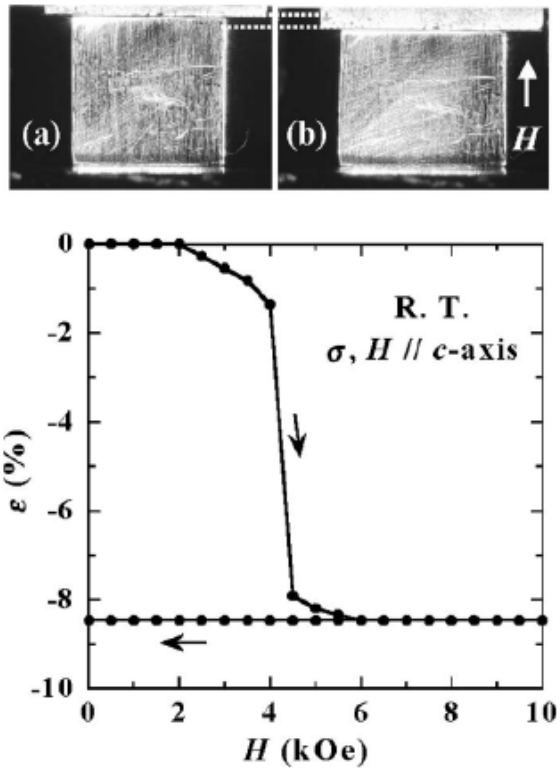


図21 $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ 合金に予め 8 MPa の応力を印加した状態で磁場を加えた時に生じる双晶磁歪

ネルギーが増加することがわかる。

以上の情報に基づき室温以上にキュリー温度とマルテンサイト変態温度を有する $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ 合金を選定し、マルテンサイト相に歪を与える事によりマルテンサイト単結晶を作製して磁化特性を調べた。しかし、マルテンサイト相の結晶構造がバリアント界面の移動度が低い 2M ($L1_0$)型マルテンサイト相であるために、0.1%以下の磁場誘起ひずみしか得られなかった。そこで、磁場誘起ひずみが予想される歪方向に界面移動をアシストする応力を 8 MPa 印加して磁場を与えたところ、図21に示すように 8%もの巨大な磁場誘起ひずみを得ることに成功した。(Morito et al., APL, 90(2007) 062505)

(b) NiMnX 系における新型磁性形状記憶合金

新規の磁性形状記憶合金を探索する目的で NiMnX 系（X:Si,Ge,In,Sn,Sb）合金の磁気特性やマルテンサイト変態の有無を調査した。その結果、ホイスラー構造の化学量論組成である 2:1:1 の組成比ではマルテンサイト変態が生じない事が判明した。そこで、マルテンサイト変態が高温で得られる NiMn 組成の方向へ X 元素と Mn を置換する事により特性を調査した。その結果、X が Si や Ge の場合には、広い2相域が存在するために室温でマルテンサイト変態する合金を得る事が出来なかった。しかし、In, Sn, Sb においては母相が室温付近で磁気変態を生じると共に、マルテンサイト変態も室温付近で起こさせる事が出来る事を確認した。その中でも特に NiMnIn 系では、低温のマルテンサイトに変態するに伴い磁化の大きな低下が見られた。この合金に2T以上の強磁場を印加しても、母相に比べマルテンサイト相の磁化は非常に小さく、7T の磁場印加によりマルテンサイト変態温度の大きな低下が確認できた。

NiMnIn 系合金の母相のキュリー温度は室温付近であるため、室温での磁場駆動には向いていない。そこで、NiFeGa 系と同様 Ni に対して Co を置換したところ、5%Co の置換でキュリー温度が約 100 度程度上昇することがわかった。図22は、このようにしてえられた $Ni_{45}Mn_{36.6}In_{13.4}Co_5$ 合金の熱磁化曲線を示している。マルテンサイト変態温度は室温付近に位置し、7 テスラの磁場により約 30K も変態温度が低下することがわかった。また、270K や 290K の磁化曲線においては、図23に示すように磁場印加途上で常磁性マルテンサイトから強磁性母相への逆変態、すなわちメタ磁性相転移が確認された。さらに、予め 3%の圧縮ひずみを付与した $Ni_{45}Mn_{36.7}In_{13.3}Co_5$ 単結晶試料に磁場を印加したところ図24に示すようなほぼ完全な形状回復が得られた。この形状回復は、メタ磁性相転移により生じる形状回復であることから、我々はメタ磁性形状記憶効果と命名した。（Kainuma et al., Nature, 439(2006) 957)

(c) メタ磁性形状記憶合金の探索

(b)に記した特異な特徴を持つ形状記憶合金系は、従来まったく報告されていない。しかし、マルテンサイト相の磁化が十分に低くない不完全なメタ磁性型である NiMnSn 系に Co を添加すると、マルテンサイト相の磁化が異常に低下することを見出した。また、3元系では強磁性母相から強磁性M相へ変態する通常の強磁性型 NiMnAl 合金に 10%程度の Co を添加すると完全なメタ磁性型に変化することを突き止めた。（Kainuma et al., APL, 93(2008) 091906)

② 成果の位置づけ

計算状態図のシミュレーション結果を利用して合金探索を行い、NiCoFeGa、NiMnIn、NiCoMnIn、NiCoMnAl 合金などの新規な強磁性形状記憶もしくはメタ磁性形状記憶合金を開発することが出来た。本プロジェクトを通して新たに開発された磁性形状記憶合金は表1に示すように6合金系にものぼり、いずれも応用物理系では最も権威のある学術誌に掲載されている。また、従来に無いメタ磁性形状記憶効果を世界に先駆けて示した成果は、Nature 誌にも掲載され世界的に大きな反響があった。これらの成果により、2006 以降関連分野の多くの国際会議で招待講演を依頼されており、世界において本研究グループに対するセンター的位置づけが定着した。

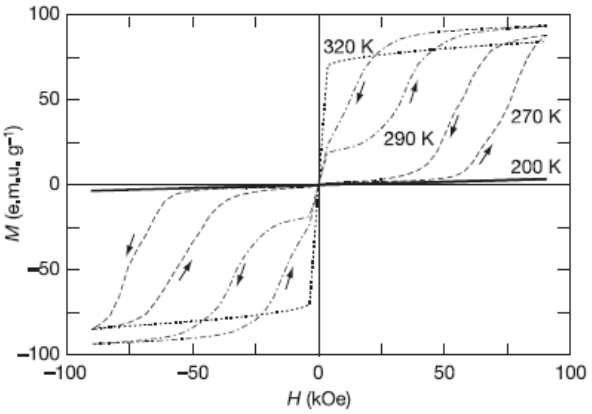


図22　$Ni_{45}Mn_{36.6}In_{13.4}Co_5$ 合金の磁化曲線。270k や 290k においては、常磁性M相から強磁性母相へのメタ磁性転移が確認された

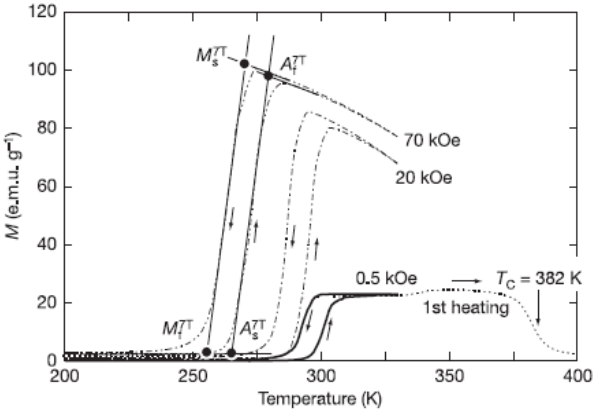


図23　$Ni_{45}Mn_{36.6}In_{13.4}Co_5$ 合金の熱磁化曲線。7 テスラの磁場で 30K 程度マルテンサイト変態温度が低下する

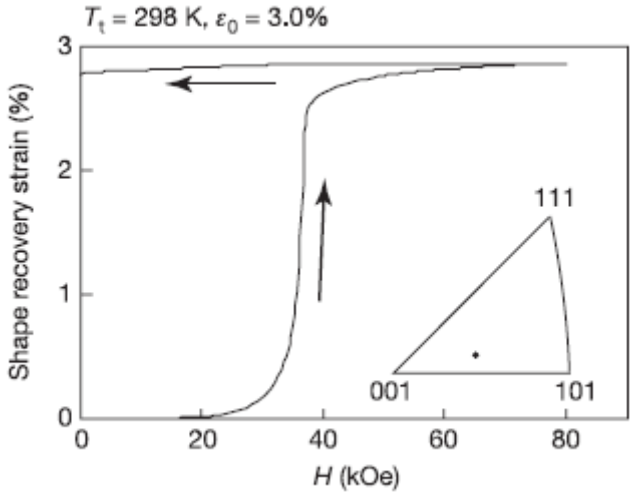


図24　$Ni_{45}Mn_{36.7}In_{13.3}Co_5$ 合金単結晶において初めて検証された磁場誘起形状記憶効果（メタ磁性形状記憶効果）

表1、現在までに報告されている主な磁性形状記憶合金

（クレスト:本研究での発見。*:メタ磁性型）

NiMnGa(1984)	英国、ラフバラ大	NiCoGa(2001)	米国、メリーランド大	*NiCoMnIn(2006)	**クレスト (Nature)**
FePd(1998)	米国、メリーランド大	NiFeGa(2002)	東北大	*NiCoMnSn(2006)	**クレスト (APL)**
FePt(2000)	阪大	*NiMnIn(2004)	**クレスト(APL)**	NiCoFeGa(2007)	**クレスト (APL)**
NiCoAl(2001)	東北大	*NiMnSn(2004)	**クレスト(APL)**	*NiCoMnAl(2008)	**クレスト (APL)**

(2) 研究成果の今後期待される効果

1996 年に NiMnGa 合金でマルテンサイト兄弟晶の界面移動機構（双晶磁歪）による磁場誘起歪が報告されて以来、世界中の多くの研究者が本合金系についての研究を行ったが、近年、双晶磁歪機構では 5MPa 程度の弱い出力しか出せないことが判明した。本プロジェクトで見出された NiMnInCo 合金のメタ磁性形状記憶効果は機構が異なり、100MPa 以上の力が取り出せることから、磁性形状記憶合金の第 2 世代とも言うべき存在である。メタ磁性形状記憶効果が見出されたの 2006 年と日も浅いことから、基礎・応用両面で未解決な問題も多く、今後の大きな飛躍が期待される。また、メタ磁性形状記憶効果は相変態に起因することから、本プロジェクト終了後も現象のもっともの根源的な理解を与えてくれる熱力学的解析をさらに進める必要がある。

3．3 鉄鋼材料のシミュレーション

(1) 研究実施内容及び成果

(a) 鉄鋼材料の硫化物の熱力学データベース構築（東北大学　石田、及川、グループ）

① 研究のねらい

Fe 基および Ni 基合金中の材料特性は、硫化物，酸化物，窒化物，炭化物などの析出物の形態、分散状況に影響されることが知られており、それらの制御メカニズムを明らかにすることが望まれている。状態図は上記化合物の Fe 基および Ni 基合金中のおける相安定性を予測するのに不可欠なツールである。本研究グループでは硫化物、酸化物、窒化物等の相平衡および析出挙動を予測するための基本となる熱力学データベースの構築を行う。

② 研究実施方法

合金法および拡散対法を用いて作製した試料の分析を行い、各種相平衡に関するデータを蓄積する。得られた実験データと文献等より取得したデータをコンピュータにより熱力学的解析を行い、対象となる合金系の熱力学パラメータを決定する。

③ 研究成果

ここでは Fe 中の TiS,$Ti_4C_2S_2$,CrS,MnS の計算結果を中心に報告する。図25は，本研究で拡散対法により得られたデータより決定した熱力学パラメータを用いて fcc-Fe 中における TiS および $Ti_4C_2S_2$ の溶解度積の計算結果を過去に提案されている溶解度積と比較して示したものである。過去に提案された溶解度積は，研究者によるばらつきが非常に大きく信頼性に乏しかった。本研究で決定した溶解度積は，過去に提案された溶解度積の式とは一致しなかった。しかしながら，Yang らや Subramanian らの実験データと良い一致を示していることがわかる。この結果は，従来の組織観察により決定していた溶解度積に関するデータは，実験の温度間隔や組成間隔等に依存しており，本研究で決定した溶解度積は多くの実験データを矛盾なく説明できることからより信頼性が高い計算結果であるということが言える。

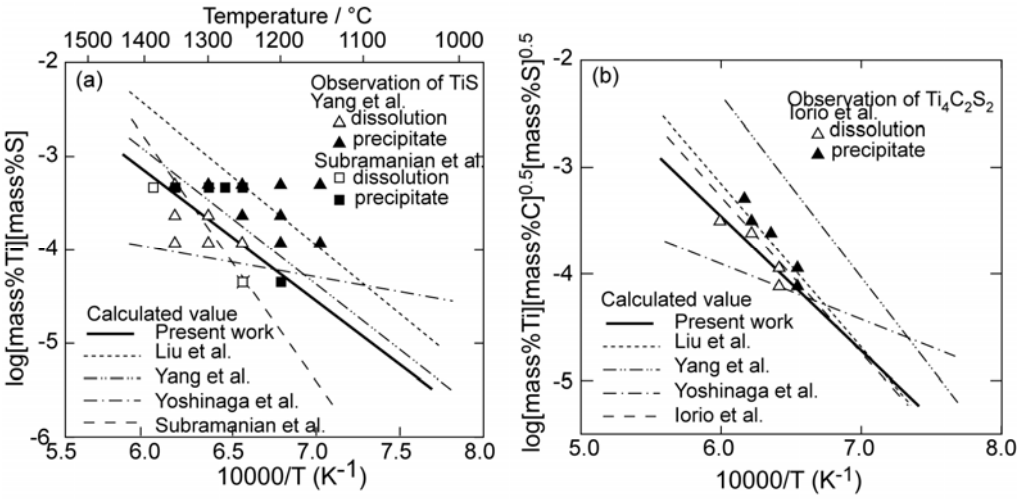


図25 fcc-Fe 中の溶解度積 (a)TiS, (b) $Ti_4C_2S_2$.

表2 ステンレス中に TiS として析出する Ti 量の実験結果と計算結果の比較

Temp. [?C]	Chemical composition (mass%)			Chemical composition (ppm)			Ti content of residue (mass%)	Calculated Ti content (mass%)
	Cr	Mn	Ti	C	S	N		
1250	11.67	0.23	0.19	57	82	68	0.041	0.045
1200	11.67	0.23	0.19	57	82	68	0.045	0.048
1100	11.67	0.23	0.19	57	82	68	0.046	0.051
1000	11.67	0.23	0.19	57	82	68	0.049	0.053

表3 Fe 中に TiS として析出する Ti 量の実験結果と計算結果の比較

Chemical composition (mass%)		Chemical composition (ppm)			Temp. (°C)	Ti content of extracted sulfides (mass%)	Calculated Ti content of sulfides (mass%)
Mn	Ti	C	S	N			
0.006	0.028	27	80	4	1250	0.008	0.006
0.01	0.020	26	170	6	1100	0.015	0.013
0.01	0.017	23	30	4	1000	0.007	0.009
0.01	0.017	12	30	4	1100	0.004	0.007

表 2は, Yoshinaga らが電解抽出により決定した硫化物として析出している低炭素鋼中の Ti 量と本研究の熱力学データベースを用いて計算結果の比較を示している。計算結果と実験データは非常に良い一致を示している。表3は, Tsuge らが電解抽出により決定した硫化物として析出しているステンレス鋼中の Ti 量と本研究の熱力学データベースを用いて計算結果の比較を示している。計算結果と実験データは非常に良い一致を示している。図26は Ni 基合金(Ni-15Cr-10Fe)合金中の S の固溶限に関する実験結果と本研究の計算結果の比較を示している。計算結果と実験データは非常によい一致を示している。以上より、本研究で開発しているデータベースは、低炭素鋼、高

合金鋼、Ni 基合金にまで広く適用が可能である。Niikura ら Fe-0.0022C-0.16Mn-0.0028S-0.07Ti-0.0045N 鋼において、1250℃から 950℃まで通常の冷却した場合、MnS と TiS の競合析出し、950℃で熱間圧延を行った場合は $Ti_4C_2S_2$ が観察されと報告している。図27は、同組成の合金の冷却時の析出挙動を計算した結果を示している。950℃では、安定系で冷却した場合は $Ti_4C_2S_2$ が析出し、準安定系で冷却した場合は TiS や MnS が析出することが予測される。つまり、Niikura らのデータは、準安定系の化合物の析出が競合していたものが、加工誘起により安定系の化合物へ変化したものと理解することができる。 Ti や Mn と同様に鉄中で S と強い親和力を示す Nb、V を含む状態図計算もこれまで行われてきていない。Fe-Nb-S 系および Fe-V-S 系についても相平衡および溶解度積を求め、状態図の解析しコンピュータにより計算できるようにしている。図28は，FeS-NbS および FeS-VS 擬2元系状態図を示している。FeS-NbS 擬2元系が NiAs 型構造の2相分離が存在することが明らかとなった。一方、FeS-VS 擬2元系は全率可溶型の状態図となることが確認された。図29は本研究で実験的に計算した鉄中における VS、NbS の溶解度積と計算により決定した溶解度積を他の硫化物の計算値とともに示している. 計算値は，実験値を精度よく再現することができた。また、この結果より、鉄鋼材料中では TiS>MnS>VS>NbS の準に安定であることが明らかとなった。以上のように Fe-Nb-S および Fe-V-S 系の状態図も計算で求めることができるようになった。また、Cu2S はケイ素鋼板の集合組織を制御する析出物としてしられているだけでなく、最近では、スクラップ等から混入する Cu が Cu2S を形成し、ミクロ組織形成に著しく影響することが知られている。しかしながら Fe 中における Cu2S の相平衡を計算で来るデータベースは、まだ存在していない。そこで，Fe-Cu-S 系について熱力学的な解析を行い、状態図計算のための熱力学関数の最適化を行っている。図30は 1350 および 1000℃における Fe-Cu-S3元系計算状態図を示している。ギブスエネルギーの近似にイオン溶体モデルを用いることにより Fe-Cu-S3元系全体を計算できるようにすることに成功している。また、実験値と比較して、液相金属と液相硫化物の2相分離も含めて精度よく一致しているといえる。図31は本プロジェクトで得られている Fe-Mn-S および Fe-Cu-S 系および従来報告のある Fe-Mn-Cu 系の熱力学データを組合わせて Fe-Mn-Cu-S 系を計算した結果である。図31のように MnS, Cu の複雑な析出挙動を再現することに成功している。

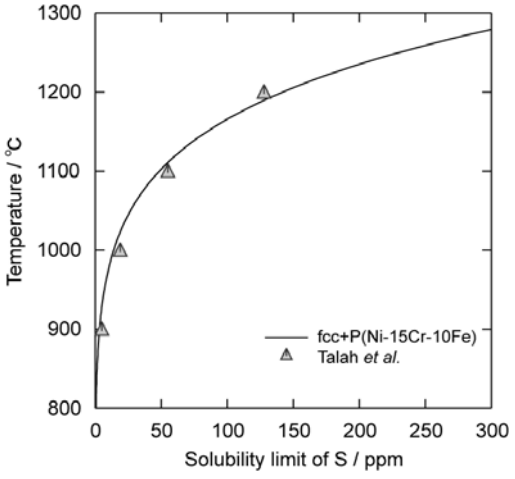


図26 Ni 基合金中の S の固溶度

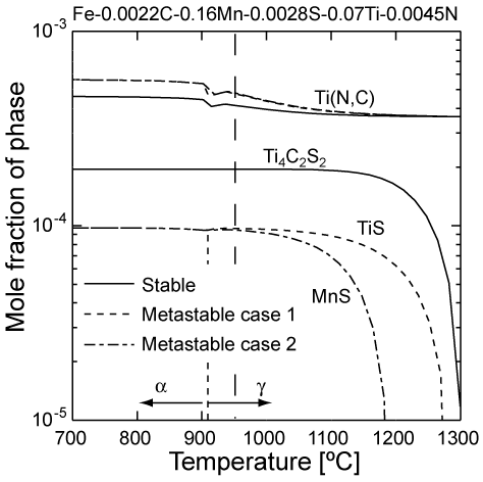


図27低炭素鋼中の化合物の析出挙動

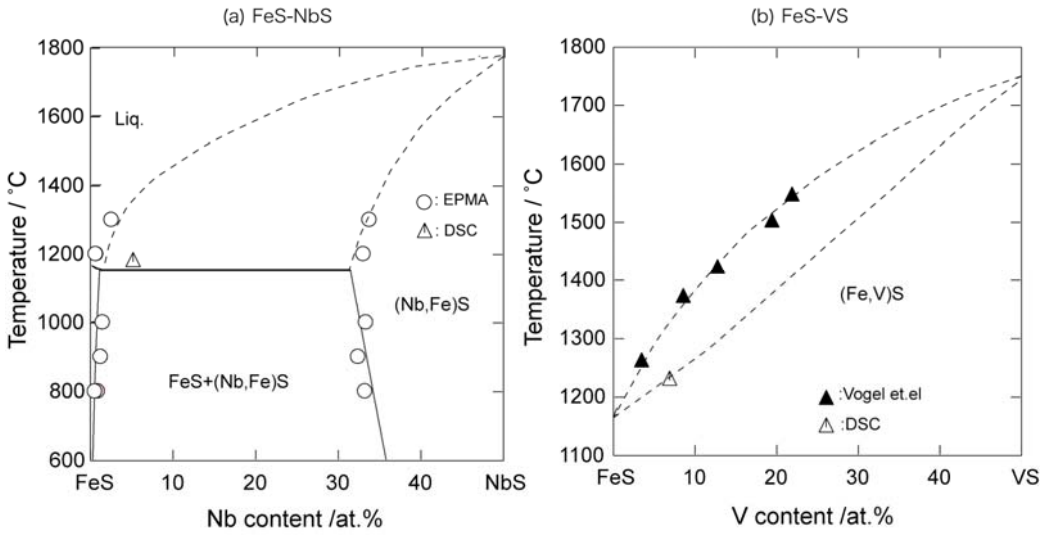


図28　(a) FeS-NbS and (b)FeS-VS　擬2元系状態図

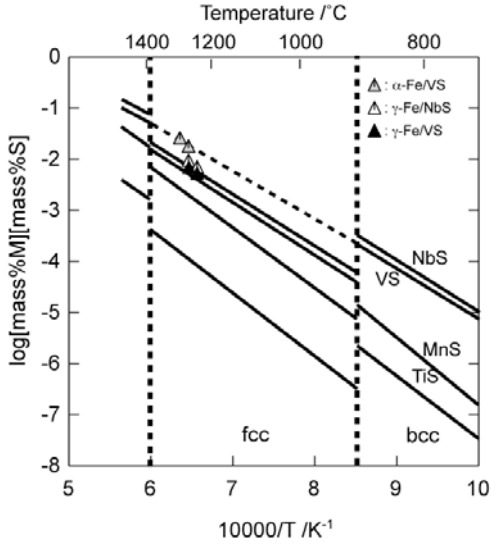


図29　鉄中における各種硫化物の溶解度積

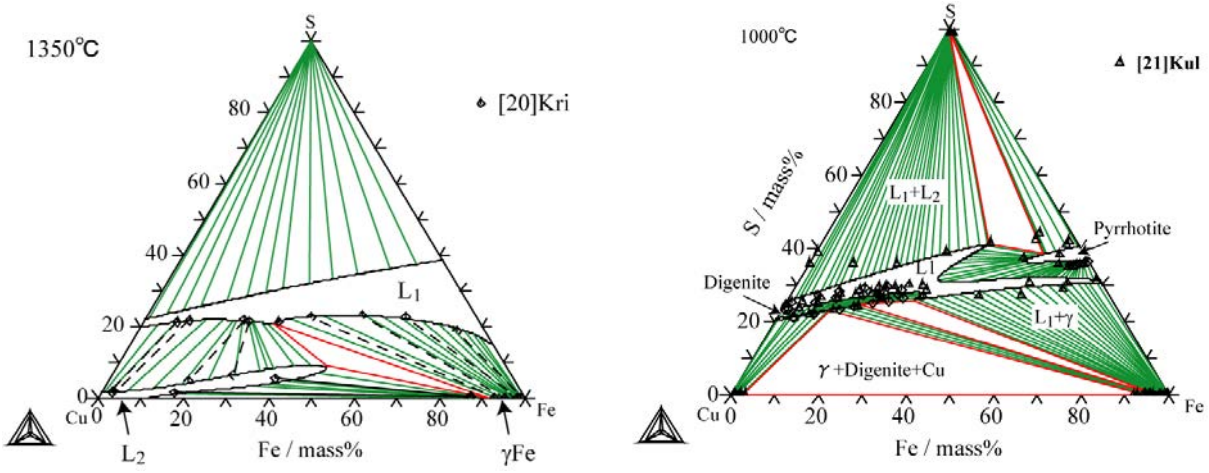


図30　1350℃および1000℃における Fe-Cu-S3元系計算状態図

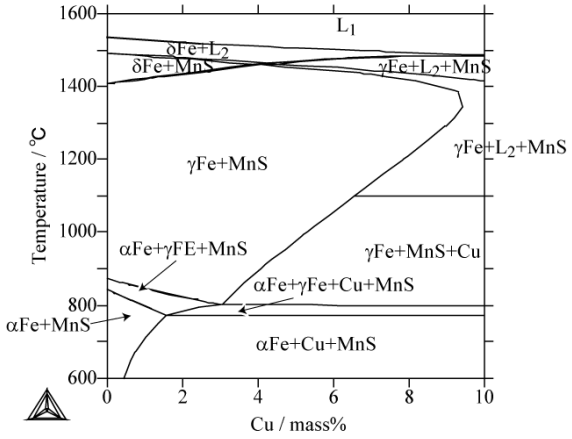


図31　Fe-Mn-Cu-S 系計算状態図

(2)　研究成果の今後期待される効果

硫化物を含む鉄鋼材料に関する熱力学データベースを構築した。これらのデータベースは一部商品化も開始した。これらデータベースと組織形成シミュレーションを連成させることにより、鉄鋼材料の組織形成予測に役立つと考えられる。また、硫化物は固体潤滑剤や熱電材料としても期待されており、本データベースの硫化物の部分は、それらの材料開発にも応用が期待できる。

(b)　均質化法による鉄鋼材料の機械的性質の予測シミュレーションシステムの開発

（東北大学　寺田グループ）

(1)　研究実施内容及び成果

①　研究のねらい

鉄鋼材料に代表される多結晶金属について、熱力学データベースに基づく数値シミュレーションにより、そのミクロ組織を数値的に予測することができるようになってきたが、そこで得られた結果を用いて、個々の材料の物性と幾何性状からマクロな機械的特性を予測するツールは完備されていなかった。本研究では、均質化理論に基づくマルチスケール解析手法を導入して、フェーズフィールド法などの熱力学シミュレーションで予測した。あるいは実験計測で取得した金属材料のミクロ組織のディジタル画像情報を、(i)ソリッドおよび有限要素法（FEM）メッシュデータに変換するツール、(ii)FEM 解析によるマクロな機械的特性の評価ツール、および(iii)マクロ応力－ひずみ応答曲線の図化、ミクロ領域での変形・応力状態の可視化など、プリ・ポストプロセスツールを具備した数値材料試験システムを整備する。

②　研究実施方法

本研究は、ミクロ構造のディジタル画像からレベルセット関数を用いて、実構造の幾何性状を忠実に再現したミクロモデルを生成する手法を提案するとともに、その技術を実装したユーザーフレンドリーな GUI を備えたソフトウェア「マルチスケール解析プリ・ポスト処理システム」を開発する。本手法およびソフトウェアが完成すれば、同研究グループにおいて別途開発が進められている、フェーズフィールド法を用いた材料組織形成シミュレーションソフトウェア「材料組織形成計算システム」の出力として得られる2次元および3次元ディジタル画像、ならびに既存材料のミクロ組織観察に際して得られる2次元データの利用を前提として、均質化理論に基づく数値材料試験により

材料のマクロな（巨視的な）機械的特性の予測と材料内部のミクロな（微視的な）力学挙動の観察・評価が可能な有限要素法による解析システムのためのプリ処理およびポスト処理システムを開発する。

③ 研究成果

(a) レベルセット関数を用いたソリッドモデリング

本研究では、材料ミクロ構造のディジタル画像（ピクセル・ボクセルデータ）を入力データとし、レベルセット（Level-Set）関数を用いることで、材料界面などの物理境界点の抽出位置を決定する。Level-Set 関数を用いて定形メッシュのライン上に物理境界点を抽出し、それに循環する線を作るために結合情報を与えることで境界を定義し、内外の判定を介して最終的なソリッドモデルを構築する。。そして、そのソリッドモデルを汎用FEMソフトウェアに読み込んでFEMメッシュを生成する。

なお本研究では、この汎用 FEM ソフトウェアに ANSYS 採用する。また、本研究では生成したミクロモデルは均質化法に基づくマルチスケール解析へ適用することを念頭においているため、生成されたミクロモデルは幾何学的にも周期対称条件を満足するモデルに変換する。

(b) モデリング適用例

図32に、2 相複合組織鋼のミクロ構造への適用例を示す。この例では、実際の DP 鋼ミクロ構造のディジタル画像（図32(a)）から、レベルセット関数値を決め（図32(b)）、物理境界を抽出する（図32(c)）。そして、これに基づいてソリッドモデル（図32(d)）を生成し、さらに幾何学的にも周期対称条件を満足するユニットセル（図32(e)）へと変換している。また、多結晶構造のモデリングを行う際は、3種類以上の材料が接する境界を抽出し、元画像を階層化した後、レベルセット関数による境界の抽出を行い、多重材料界面を含めた循環する結合情報を定義することでソリッドモデルを生成する。多結晶構造への適用例を図33に示す。

(c) 数値材料試験の実施例

ここでは、提案手法によって生成したミクロモデルを用いて、均質化法に基づく数値材料試験を行い、マクロ機械特性の評価例を示す。具体的には、ミクロスケールの幾何性状を提案するモデル化手法により忠実に再現したミクロモデルと、幾何性状を理想化したミクロモデルのそれぞれを用いて数値材料試験を行い、マクロ成形性能の比較を行う。

(c-1) 成形限界曲線による DP 鋼の成形性能評価

図32に示す DP 鋼のミクロモデルに対して数値材料試験を行う。DP 鋼はフェライト相（　相）を母材としてマルテンサイト（'相）が含まれる二相構造である。α相とα'相に共通の弾性係数（Young 率 206 GPa、Poisson 比 0.2）と個別の塑性特性を仮定してミクロスケールの数値解析に用いる。ここでの目的は、ミクロ構造の幾何学的特性がマクロ挙動に及ぼす影響を考察することであるため、両モデルの　相、 '相の体積率を一定とし、要素数、節点数も同程度に設定している。

ミクロモデルに対して直交座標系を定義し、Y_1方向に最大、Y_2方向に最小ひずみが生じるよう比例負荷を与える。その際のひずみ経路は Y_1 方向一軸引張から等二軸引張状態を限度として6経路（図34(a)左参照）を設定して数値材料試験を行う。各経路についてのマクロ的な成形限界は、マルチスケール解析で得られたマクロ公称応力の最大主値がピークに達するときにマクロな破断

が生じることで発現するものと仮定し、そのときの最大・最小のマクロ真ひずみをひずみ空間にプロットすることで成形限界曲線を作成する。成形限界曲線および一軸、等二軸引張状態のひずみ経路で囲まれた領域がマクロな破断が生じることなく成形できる範囲となり、マクロな変形特性を評価する指標となる。

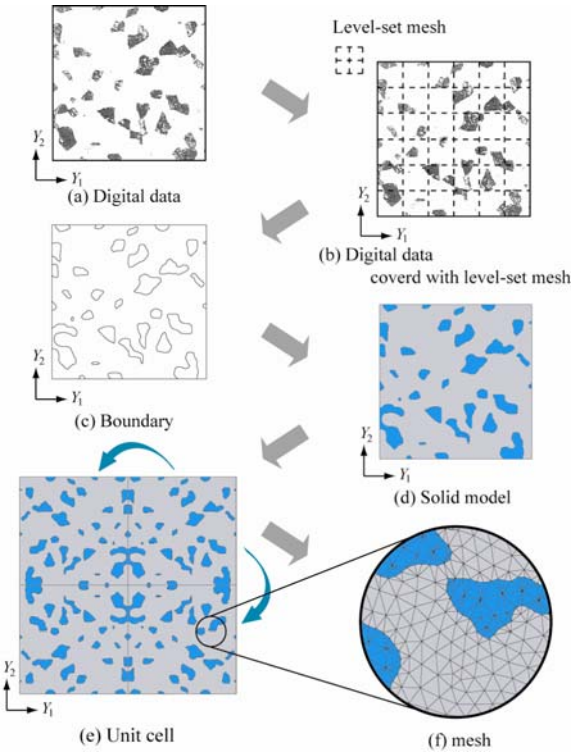


図32　相複合組織鋼に対するレベルセット関数を用いたリゾットモデリングとメッシュ生成手法の適用例

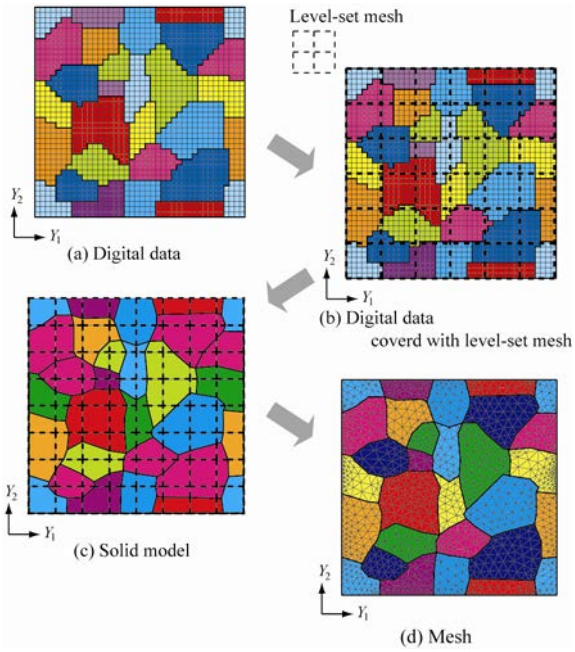


図33　多結晶金属に対するレベルセット席数を用いたリゾットモデリングとメッシュ生成手法の適用例

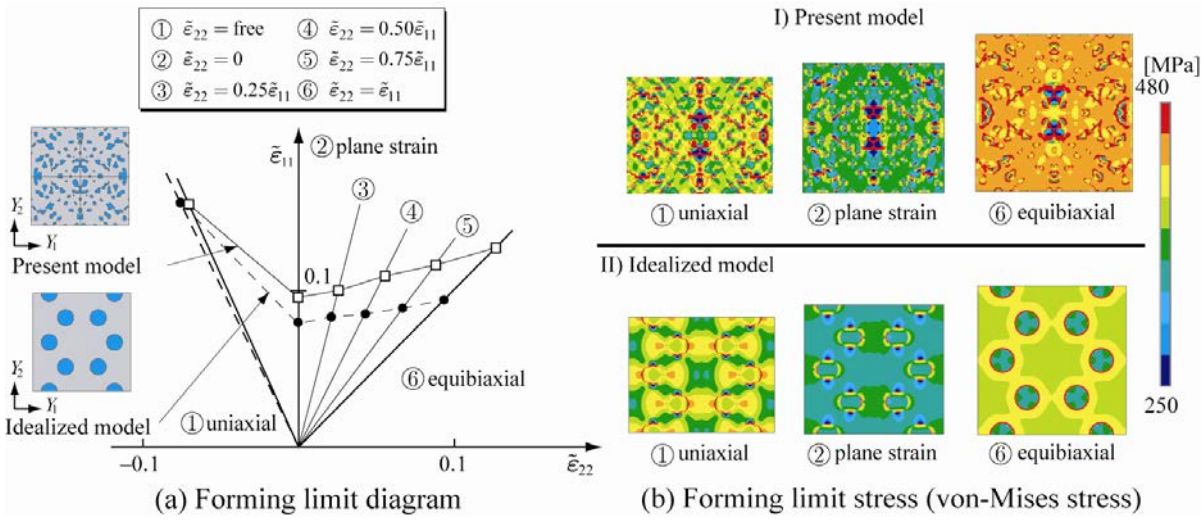


図34　数値材料試験によるミクロ構造を考慮した DP 鋼のマクロ成形限界の評価例

(c-2)　マクロ成形性能のミクロ依存性

数値材料試験の結果として得られたマクロ成形限界曲線を図34(a)に示す。また、図34(b)は、一軸引張載荷、平面ひずみ載荷、等二軸引張載荷の各ひずみ経路について、マクロ成形限界時にミクロ構造に生じている相当応力の分布を示したものである。一軸引張載荷条件下においては、マクロ成形限界時のミクロ相当応力分布にほとんど差異は見られないが、平面ひずみ載荷、等二軸載荷の順にその差が顕著になることが分かる。平面ひずみ状態では、幾何形状を理想化したモデルと提案手法でモデル化したものの結果の差異はミクロスケールの局所的な領域に限られるが、等二軸載荷条件化における両モデルのミクロ相当応力分布を比較すると、幾何性状を忠実に再現した提案手法によるミクロモデルの方がミクロ構造全体に高い応力が作用している状態でマクロな成形限界に達している。

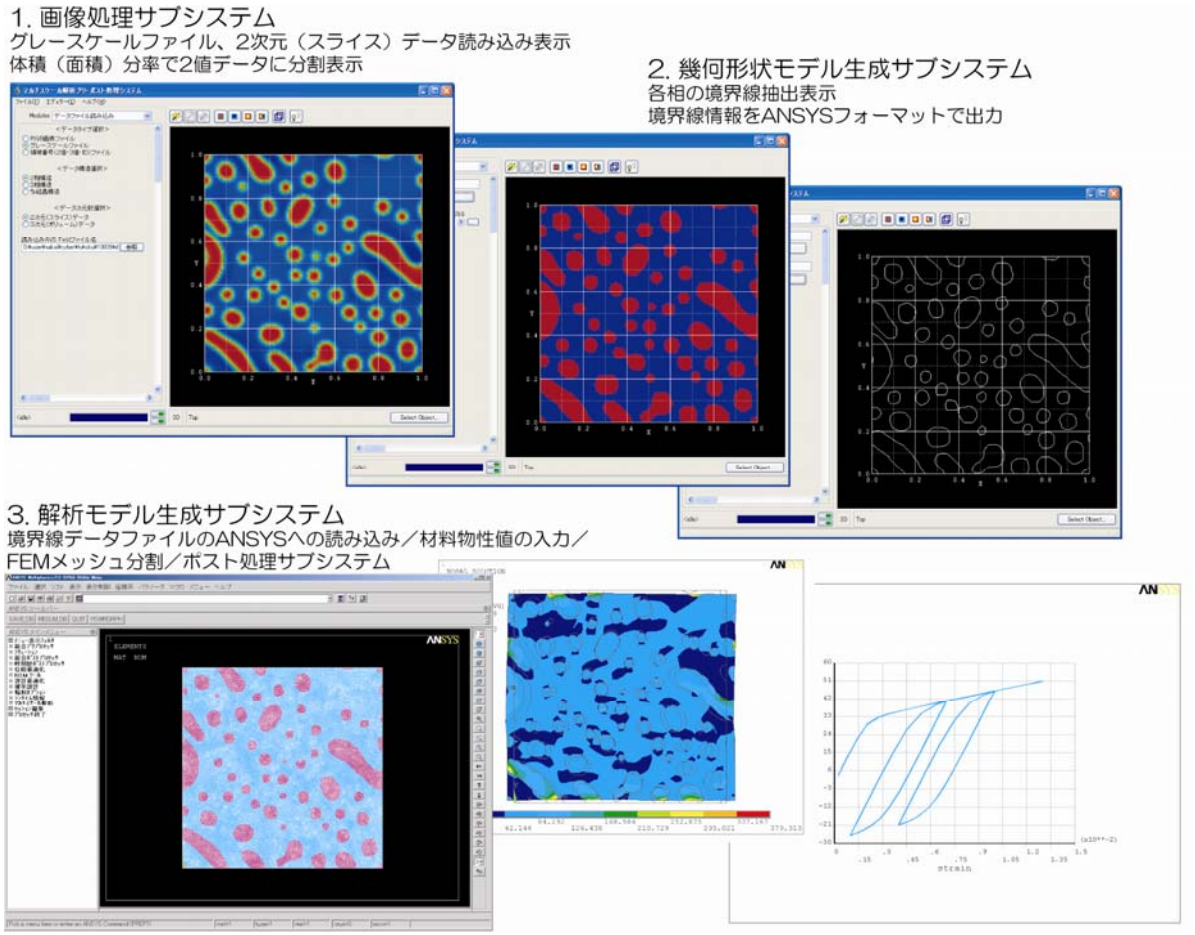


図35　マルチスケール解析プリ・ポスト処理システムの機能と解析結果の一例

このようなミクロ挙動を反映して、マクロスケールの成形性能は一軸載荷条件化では両モデルに差はほとんど見られないが、多軸載荷条件下では直交方向の荷重の増加に伴い、マクロ成形性能の差が顕著になる。2方向以上に負荷を受けるような多軸負荷の条件では、理想化されたミクロモデルにより評価されるマクロ挙動は信頼性の面で難があり、はミクロモデル生成に際して幾何形状をできる限り忠実に再現することの必要性を裏付ける結果であるといえる。

(2)研究成果の今後期待される効果

本研究の最終目標は、均質化理論に基づくマルチスケールモデリングにより材料のマクロな（巨視的な）機械的特性の予測と材料内部のミクロな（微視的な）力学挙動の観察・評価を可能とする有限要素解析に際して必要となる、プリ処理およびポスト処理プログラム群である「マルチスケール解析プリ・ポスト処理システム」を開発である。このシステムは、同研究グループにおいて別途開発が進められている、フェーズフィールド法を用いた材料組織形成シミュレーション・プログラム群を統合化したプラットフォーム「材料組織形成計算システム」の出力結果として得られる2次元および3次元ディジタル画像、ならびに既存材料のミクロ組織観察に際して得られる2次元ディジタル画像を元データとすることを前提としている。図35は、フェーズフィールド法で得られた、ある材料の2次元ミクロ組織を題材に、開発を進めているソフトウェアの機能の一部を紹介するものである。今後は、このソフトウェアをより高度化し、均質化法に基づくマルチスケール解析ツールと統合することで、汎用的な数値材料試験ツールに発展させ、材料のミクロ組織の情報から様々なマクロ機械特性の評価が可能な環境を整えて行く予定である。

3．4 Phase-field 法による組織形成過程のモデル化及び組織・特性予測、ならびに合金組成自動探索システムの開発（(独)物質・材料研究機構グループ）

(1)研究実施内容及び成果

① 材料の微視的内部組織形態形成の計算法および内部組織情報に基づく材料特性の計算法の確立が本グループの研究の基本的なねらいである。具体的な解析対象は、以下のように分類される。

(A) エレクトロニクス実装材料における組織形成シミュレーション
(B) 磁性材料における材料内部組織形成シミュレーションと特性解析
(C) 鉄鋼材料の材料内部組織形成シミュレーション
(D) 材料組織形成計算統合化システム構築
(E) 合金組成自動探索システムの開発

② 研究実施方法

組織形成の計算手法には Phase-field 法を用いるが、Phase-field 法は、計算対象の組織形態形成に応じて計算理論式自体を全く新しく構築し直す必要がある。したがって、上記の各種の組織形成に対して、それぞれ適した計算理論およびプログラムを開発する。さらに、それらの内、比較的共通的な傾向を含む理論式およびプログラムを統合化システムとして再構築する。

③ 研究成果

研究成果に関して、上記(A)～(E)についての成果を説明する。

(a) エレクトロニクス実装材料における組織形成シミュレーション

図36は、Sn-5wt%Bi はんだのランド上部における凝固開始直後における Phase-field シミュレーション結果および矢印に沿った濃度プロファイルである。ランド上部での固相成長は、過冷が 6K 前後から急速に加速され、その後 0.1s でほぼ凝固完了となる。濃度プロファイルから明らかのように、若干のミクロ偏析は確認されるものの、ランド表面付近の凝固遅れを促すようなマクロ偏析は認

められない。従来、リフトオフは、凝固偏析によりランド上部に形成される低融点液相膜が原因であるとされてきたが、本解析から、リフトオフが起こらない組成に対してもランド上部が凝固最終段階まで液相状態であること、また凝固偏析はデンドライト枝間に等しく現れ、ランド表面付近の凝固を遅らせるものでは無いことが明らかとなった。したがって、リフトオフの主因は偏析によるランド上の液相の存在ではなく、凝固収縮による負圧など他の要素であると推察される。

図37は、Sn-4.0Ag-XCu（X=0.5～1.1/mass%）合金の共晶率の予測を実プロセスの冷却条件下における第2相晶出の駆動力の大きさより試みた結果である。特に図37左図は、シャイルの式とPhase-field 法の最大液相濃度が等しくなる界面位置の違いで、この界面位置の差が共晶率の差に対応する。液相の割合が多いほど、拡散距離が長くなるために誤差が大きくなる。介在物の晶出など、凝固後期の事象を対象とするのであればシャイルの式とPhase-field 法の計算結果は一致する。一方、本研究のように、凝固初期（高共晶率）の場合、液相拡散を考慮したモデルの使用が適当であると考えられる。図37右図は、Sn-4.0Ag-0.5Cu 合金において固相率（β-Sn 相率）0.58 の駆動力を基準として、Sn-4.0Ag-XCu（X=0.5~1.1mass%）合金の共晶率の試算を行った結果である。Cu=1.1mass%の添加で、ほぼ 100％の共晶率が得られ、この結果は実験的とも良い一致を示している。本解析から、第2相を化合物と仮定、晶出の駆動力を計算することによって、共晶率の予測が可能であることが示唆され、さらに高共晶率範囲では、液相の完全混合を仮定するシャイルの式では予測誤差が大きくなることが明らかとなった。

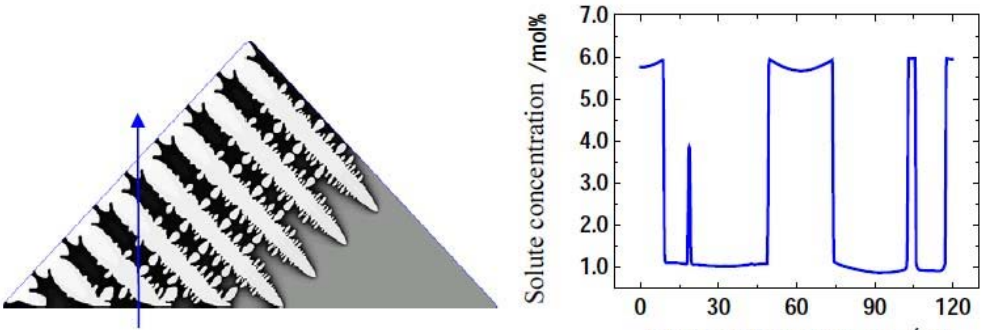


図36　Sn-Bi 系の凝固過程の Phase-field シミュレーションと左図矢印に沿った濃度プロファイル

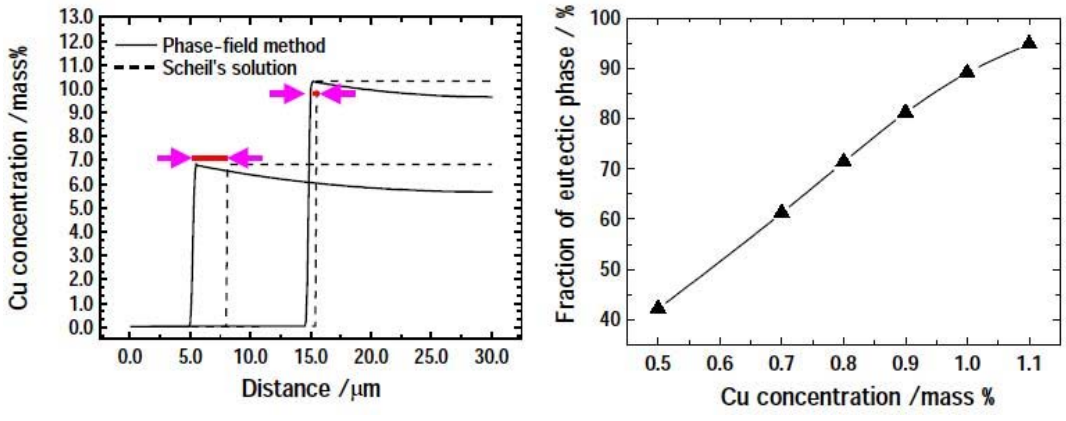


図37　Phase-field 法とシャイルの式による濃度計算の差異、および Cu 濃度と共晶率の関係

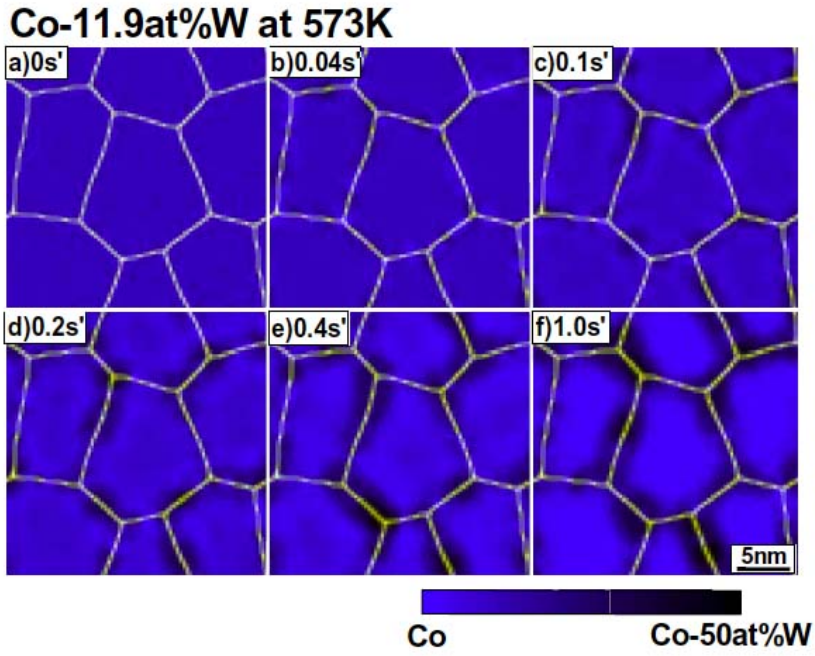


図38　Co-11.9at%W の 573K における薄膜形成時の組織形成計算結果

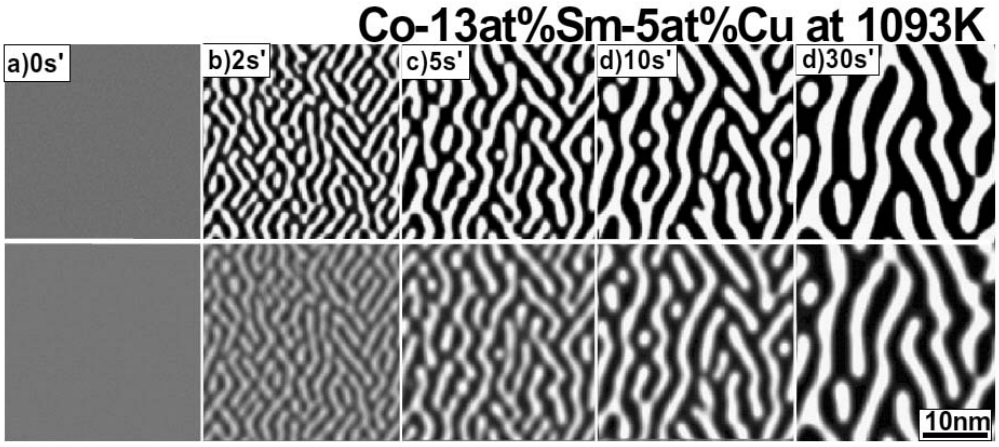


図39　1093K 等温時効における Co-13at%Sm-5at%Cu 合金の2次元相分離シミュレーション
（上段が Sm、下段が Cu 濃度を白色度にて表している）

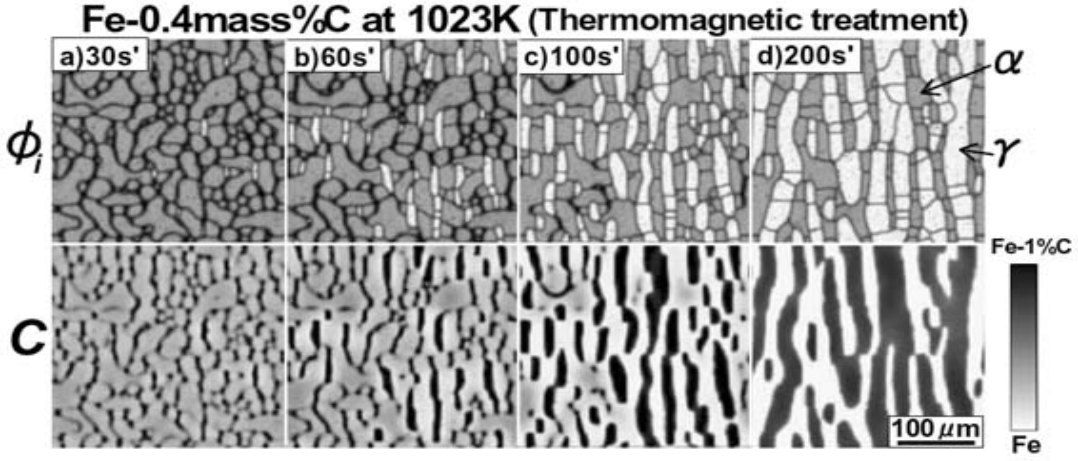


図40　外部磁場下における、Fe-0.4mass%C の 1023K 等温時効における組織変化

(b) 磁性材料における材料内部組織形成シミュレーションと特性解析

図38は基板上にスパッタリングにて形成される Co-W 合金膜の相分離過程を形成成長させる状態を Phase-field 法を用いてモデル化し、シミュレーションした結果である（2次元計算）。合金相の平均組成は、Co-11.9at%W で、図中の数値は無次元化した時間、基板温度は 573K に設定した。Co-W 合金相内の青の濃淡は W 濃度を表しており、黒さの度合いが W 組成に対応している（図の下のカラーバーを参照）。これより、結晶粒の中心において Co 組成が高く、粒界近傍では逆に W 組成が高くなり、磁気記録に理想的な組織形態となることがわかる。Co-W 系の結晶磁気異方性係数の値は、現行のハードディスク材料である Co-Cr 系のほぼ5倍であるので、近未来的な次の高密度磁気記録媒体の候補として最近注目を集めている。図39は Co-13at%Sm-5at%Cu 合金の、1093K 等温時効における、$(2\bar{1}\bar{1}0)$ 面での2次元シミュレーション結果で、上下方向が hcp の c 軸方向である。図の上段が Sm 濃度を、下段が Cu 濃度を白色度にて表現し（平衡組成で規格化）、黒および白い部分はそれぞれ $Sm_2(Co,Cu)_{17}$ 相および $Sm(Co,Cu)_5$ 相に対応している。これより組織は周期的な変調構造を取ることがわかる。濃度変調の方向は、実際の本合金系の相分離組織とほぼ対応しており、組織形態が弾性拘束によって支配されていることがわかる。特にこの方向は弾性定数に起因する弾性異方性および a 軸と c 軸方向の eigen 歪の比に大きく依存する。したがって、組織の配向性を制御する場合には元素添加によって eigen 歪を変化させることが効果的であると思われる。次に各溶質成分の分布状態について、図39上段の Sm の濃度場と下段の Cu の濃度場を比較すると、まず Cu は $Sm(Co,Cu)_5$ 相に濃縮し、かつ界面位置にて Cu 濃度プロファイルが Sm に較べ非常に緩やかになっていることがわかる。最近、この Cu 濃度プロファイルの界面におけるブロード状態が本合金の磁気特性向上に影響していることが示唆されている。

(c) 鉄鋼材料の材料内部組織形成シミュレーション

図40は外部磁場下における、Fe-0.4mass%C の 1023K 等温時効における組織変化で、図中の数値は無次元化された時効時間である。外部磁場の方向は図の上下方向で、外部磁場は十分に大きく、組織内の磁気モーメントは全て上下方向に揃っていると仮定して計算を行った。上段が多結晶 α 相（フェライト）および γ 相（オーステナイト）の Phase-field ϕ_i であり、灰色の部分が α 相、白い部分が γ 相である（黒は結晶粒界）。下段が炭素濃度場 x_C である。明暗は、(白:純 Fe)および(黒:Fe-1mass%C)として、この間を炭素濃度に合わせて連続的にグレイスケールで結んでいる。まず相分解初期(a)において、結晶粒界に炭素が濃化するとともに、特に上下方向に沿った粒界にやや優先的に炭素は濃化していることがわかる。この傾向は、相分解の進行に伴い顕著となる。さらに炭素の濃化した部分は γ 相の核形成サイトとして働くので、(b)～(c)に見るように、上下方向に伸びた γ 相組織が発達する。最終的に外部磁場方向に γ 相が連なった組織形態(d)へと移行していく。このような組織変化は実験的にも確認されており、この組織の配列は配列する相同士の双極子-双極子交互作用（静磁場エネルギー）によって説明されてきたが、本計算結果は、初期の炭素の優先析出（優先配向）が組織の配向性に大きく影響することを示している。もちろん、双極子-双極子交互作用による配向組織の安定化は、原因の1つと考えられるが、これまであまり考慮されてこなかった炭素の拡散挙動も組織の配向性に重要であることを本計算結果は示唆している。炭素は当然ながら鉄鋼材料の中心元素であり、この拡散方向が磁場で制御できるのであれば、鉄鋼材料における各種の炭化物の核形成や成長挙動を制御できる可能性が広がることになり、本計算結

果の示唆する意味は、磁場を活用した鉄鋼材料の組織制御の観点から重要であると思われる。

(d) 材料組織形成計算統合化システム構築

(1) 材料組織形成計算システム

材料組織形成計算システムは、材料組織学や組織形成による分類、物質・材料に対する組織形成のテンプレートに基づき、組織形成計算を実現するシステムである。材料組織形成計算システムは、**GUI**(テンプレート選択・作成・編集機能、可視化・プロット機能)、組織形成計算部、簡易相平衡計算部から構成される。システムの機能は、以下のようにまとめられる。

①組織形成シミュレーション選択・作成・編集機能

材料組織学による分類、組織形成の種類等から組織形成計算のテンプレート(サンプル)を選択する機能を有する。また、組織形成の種類、組織形成の種別、物質・材料の種類からのテンプレートの検索機能を有する。

組織形成計算のテンプレートは、XML 形式に準拠し、組織形成の種別、物質定数、計算条件、コメント等を定義する。テンプレート作成・編集機能において、テンプレートの作成・編集・保存を可能とし、組織形成制御機能において、テンプレートに基づいた組織形成計算の入力データを生成する。

②組織形成計算機能

組織形成の種別、物質ごとの個々の組織形成計算プログラムから構成されるプログラム群とする。各プログラムは、組織形成計算テンプレートに対応する。

組織計算時におけるリアルタイム可視化(アニメーション)機能を有する。

③可視化・プロット機能

可視化の基本機能は、2次元および3次元可視化に対応し、フリンジ、アイソライン表示、等値面表示機能を有する。組織形成計算結果の表示として、濃度場、エネルギー場、ポテンシャル場の可視化、空間平均エネルギーのプロット機能を有する。また、計算結果のアニメーション機能、画像生成・保存機能を有する。

④簡易相平衡計算部

簡易相平衡計算機能を有し、計算結果の化学的自由エネルギー曲線のプロット機能を有する。

⑤ドキュメント機能

ドキュメント機能として、計算理論のテキスト(教科書)、利用説明、ヘルプ機能を有する。

以上の機能の具体的な全体構成は、図41のようにまとめられる。

以下、このシステムにて計算される材料内部組織の形態形成の計算例を示す。

図42は、Fe-40at%Cr-20at%Co3元合金の 873K 等温時効における相分離過程の計算結果である。上段が Cr 濃度および下段が Co 濃度の時間発展で、組織内の局所的な濃度をカラー表示し、青色から赤色にかけて、Cr もしくは Co 濃度が増加する。図より、スピノーダル分解によって、典型的な"まだら構造"が形成され、Cr が析出相に濃化し、Co は母相に分配されることがわかる。この合金系は、現在、磁気特性の温度依存性が非常に小さいハード磁石として実用的に使用されており、本計算はこの材料の内部組織設計に適用できる。

図43は、立方晶から正方晶へのマルテンサイト変態における、ドメイン組織形態形成の計算例である。上段および下段は、組織内の同じ場所で、それぞれ正方晶の c 軸が横および縦方向のバリ

アントを表現している。変態初期に、ツイード組織が形成され、相変態の進行に伴い、双晶組織へと発展していく。以上は、マルテンサイト変態の特徴を非常に精度よく表現しており、本計算は、マルテンサイト変態の微視組織的なメカニズムの解明に有効と期待されている。

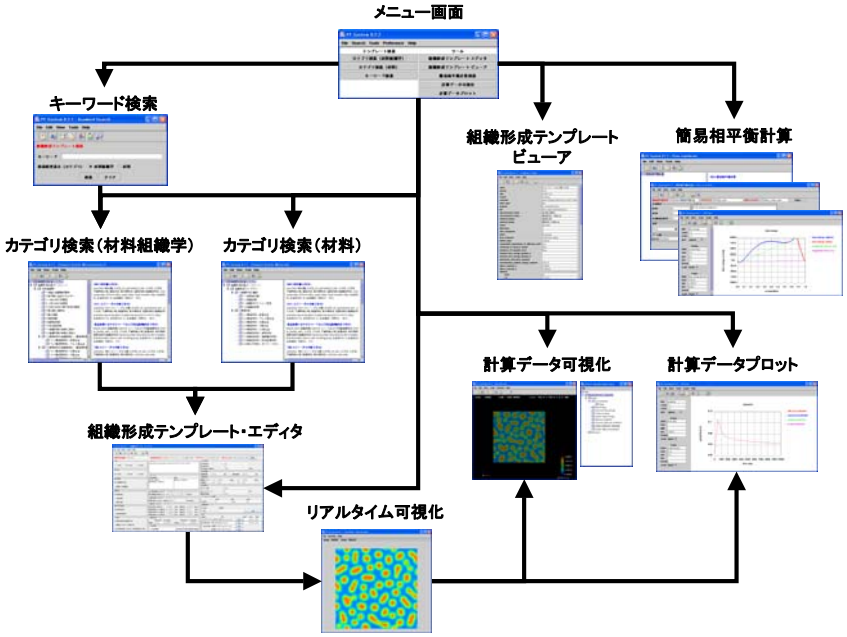


図41　材料組織形成計算システムの構成

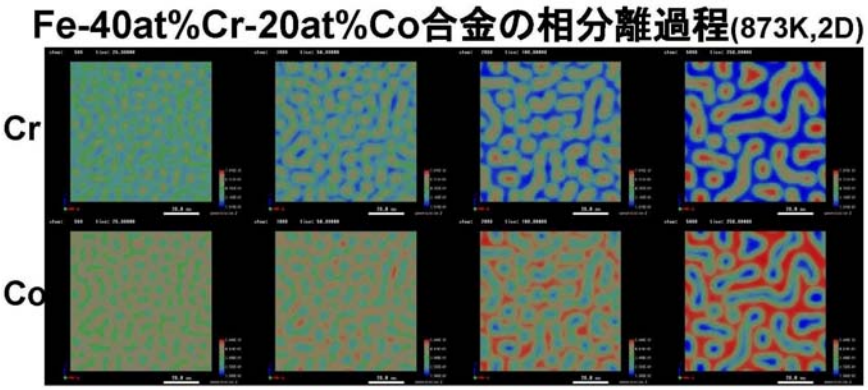


図42　Fe-Cr-Co3元合金の相分離過程の計算結果

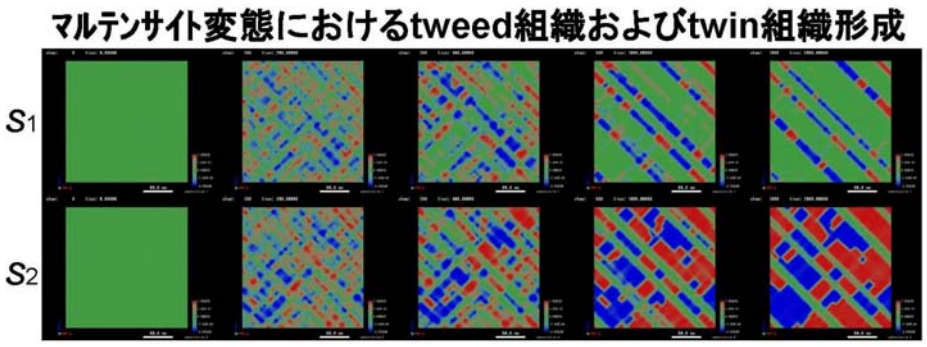


図43　マルテンサイト変態における組織形態形成

(2) 磁気特性計算システム(磁気記録媒体用シミュレーションシステム)

磁気特性計算システムは、材料組織形態を境界条件として、材料組織の局所的および全体的な磁気特性を解析するシステムである。磁気特性計算システムは、・スタートメニュー画面、・テンプレート作成・編集画面、・場(磁気モーメント場や境界条件の組織形態)の可視化画面、秩序変数プロファイル(磁気モーメントや組織形態を記述する秩序変数)のプロット画面、・磁気ヒステリシスのプロット画面から構成され、またソフトウェア内部の主要機能として、磁気特性計算部を有する。システムの機能は、以下のようにまとめられる。

①機能選択(メニュー画面)

機能選択では磁気特性計算システムの各機能をメニュー表示する。メニュー画面において、各機能を選択することにより、選択した機能の画面を表示する。

②テンプレート選択機能

磁気特性計算テンプレートを選択する機能である。画面上のツリーからカテゴリを選択することにより、選択されたカテゴリに対応するテンプレートを検索結果画面に一覧表示する。検索結果画面のテンプレートを選択することにより、テンプレート エディタを起動する。

③テンプレート作成・編集・保存・読み込み機能

テンプレートの作成、編集、保存、読み込み、およびテンプレートに従って組織形成計算を実行する機能である。画面上にテンプレートの内容を表示し、編集を行う。特性計算実行時に、テンプレートの内容からプログラムの入力ファイルを作成し、組織形成計算実行機能を実行する。

④組織形成・磁気ヒステリシス計算実行機能

組織形成計算を実行する機能である。入力データを生成し、プログラムを実行する。リアルタイム可視化を行う機能を持つ。計算結果からプロット・データの抽出を行う。可視化機能、プロット機能の呼び出しを行う。

⑤磁気特性計算実行機能

磁気ヒステリシス計算結果から、磁気特性計算を実行する機能である。

⑥計算データ可視化機能

計算結果を可視化する機能である。Fringe, Isoline, およびIsosurface(3次元)の3種類の表示方法により計算結果の物理量の表示を行う。ステップごとの可視化およびアニメーション表示を行う。可視化画面の画像保存機能を持つ。計算条件の簡易設定機能を持ち、設定した条件により組織形成計算の再実行を行う機能を持つ。

⑦計算データプロット機能

組織形成計算の計算結果のプロットを行う機能である。CSV 形式のデータ・ファイルからプロットを行う。プロット画面の画像保存機能を持つ。表示データ、表示方法、表示色等の設定機能をもつ。画面上の設定欄でタイトル、ラベル、表示範囲、メモリ幅等の設定を行う。設計シナリオに基づいた特定用途用のグラフ作成機能を持つ。

⑧リアルタイム可視化機能

材料組織計算結果のリアルタイム可視化を行う機能である。

以上の機能の具体的な全体構成は、図44のようにまとめられる。

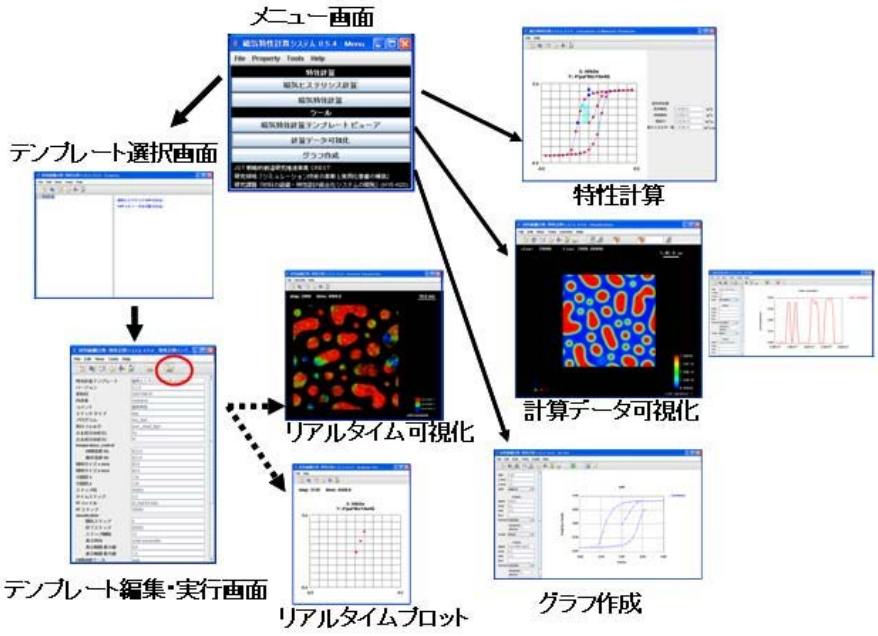


図44　磁気特性計算システムの全体構成

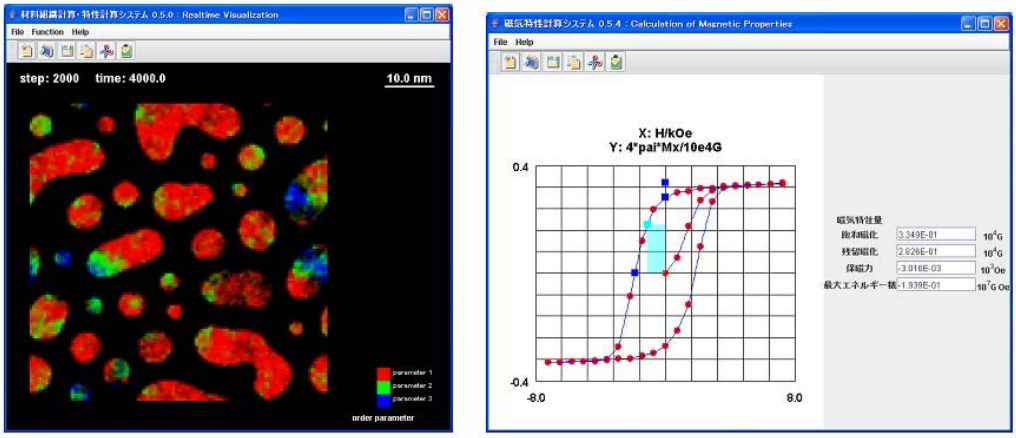


図45　磁気特性計算システムの全体構成

以上のシステムを活用することによって、材料組織形態形成のシミュレーションならびに材料組織形態情報を境界条件とした磁気特性の計算、すなわち、材料の微視的な内部組織形態が、どのように材料特性に影響しているかを定量的に解析することができる。

以下、この磁気特性計算システムにて計算される磁気ヒステリシスの計算例を示す。計算対象の材料は、次世代の高密度磁気記録材料として注目されている FePt ナノグラニュラー組織である。

図45は、組織形態情報を境界条件として、その組織に対する磁化過程（磁気モーメント場の時間・空間発展）のシミュレーション（左図）、および磁気ヒステリシスの計算結果（右左図）である。なお境界条件として用いる組織形態情報自体は、(1)の材料組織形成計算システムから計算される。

図45(左図)より、小さな FePt 粒子では、粒子全体に磁気モーメントがいっせいに反転するが、粒子サイズが増加すると、磁区移動による磁化反転機構に移行することがわかる。また組織内の磁気モーメントベクトル(横方向)を積分した値を、外部交番磁場値に対してプロットすることによって、磁気ヒステリシスが計算される(右図)。さらに、計算された磁気ヒステリシス曲線から、保持力、飽和磁化、および最大エネルギー積の値が同時に算出される。

(E) 合金組成自動探索システムの開発

合金組成自動探索システムは、融点や凝固温度範囲等目的とする物性をインプットし、熱力学データベースを用いてそれに適合する合金組成をコンピュータで自動的に探索するシステムである。特に今年度、4元系以上では処理速度を速めなければならないことを踏まえて、等温断面図を活用する形式に改修した。具体的には平衡計算等温断面図と連成させ液相線を把握しながら固相線等を計算する。添加元素濃度を連続的に処理するだけでなく非連続的な処理で探索を行うことができる。

(2) 研究成果の今後期待される効果

本研究にて開発した材料組織形成計算統合化システムは、材料組織形成のメカニズムを定量的に理解する一助となるため、新材料の効果的な開発に役立つと考えられる。さらに組織形態と材料特性が直接結びついた計算が可能となったことから、既存材料の効率的な特性最適化も可能となると考えられる。

3．5 ナノ軟磁性材料およびマイクロアロイング鋼の熱力学データベース構築（九州工業大学グループ）

(1) 研究実施内容及び成果

① 研究のねらい

熱力学的解析には相平衡や熱力学的性質などの実測値に基づいて合金相の Gibbs エネルギーを評価する CALPHAD 法を用いた。ただし、これまでの CALPHAD 法では実測値に基づいて熱力学パラメータを求めているため、実測値を得られない温度、組成領域ではパラメータの精度が劣る。

そこで本研究グループは、目的の相が安定には存在しない温度、組成領域における、つまり準安定状態の熱力学的量を第一原理計算によって求め、これを他の実測値と共に用いて、ナノ軟磁性材料およびマイクロアロイング鋼を主な対象として熱力学的解析を行った。このように第一原理計算の結果を用いることによって、相境界や熱力学的量を実測できない領域をも含めた広い温度、組成領域において精度の高い熱力学パラメータを得ることができ、また、多元系への拡張も精度よく行うことができる。

② 研究実施方法

ナノ軟磁性材料に現れるホウ化物やマイクロアロイング鋼に現れる炭化物、窒化物、燐化物およびホウ化物の熱力学的物性に関する実験的情報の不足を補うために、上記析出物の生成エネルギーを第一原理計算によって算出した。また、2元化合物への第3元素の固溶を考慮するために、第一原理計算結果に基づいて相互作用エネルギーを一部評価した。. これら第一原理計算結果とこれまでに報告されている相境界等の実験データを用い、ナノ軟磁性材料およびマイクロアロイング鋼を構成する2元系および3元系状態図の熱力学的解析を行った. さらに、ナノ軟磁性材料を構成する Fe-Si-B3元系について、状態図計算から得られた熱力学量を速度論的取扱いに導入して、アモルファス形成能の評価を行った。

また、鉛フリーはんだ合金を構成する Sn-Zn-Ti3元系状態図の熱力学的解析も行った。

③ 研究成果

表4に、第一原理計算によって得られた生成エネルギーの結果の一部を示すが、計算結果は実験結果と良い一致を示しており、本手法による生成エネルギー算出の妥当性が確認できる。図46には、複合炭窒化物の相分離の計算結果を示すが、第一原理計算結果に基づいて評価した相互作用エネルギーパラメータを相平衡計算に用いることで、相分離挙動をよく再現できることが分かる。

表4 各種析出物の生成エネルギー

Phase	Formation enthalpy (kJ/mol)	
	First-principles	Experimental
NbC	–63.5	–65.0
NbN	–100.9	–101.2
TiC	–81.3	–92.3
TiN	–167.4	–169.0
VC	–48.3	–54.2
VN	–87.1	–107.5
Fe_2P	–54.6	–53.4
Fe_2B	–30.6	–22.6
CrB_2	–33.3	–39.8
NbB_2	–72.7	–60.3
ZrB_2	–100.3	–107.7

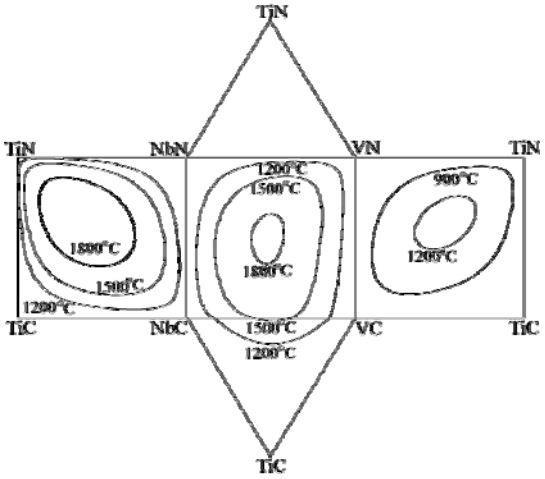


図46 複合炭窒化物における相分離

軟磁性材料の基本系である Fe-Si-B3元系における縦断面状態図およびアモルファス形成能の計算結果を示すが、いずれにおいても計算結果は実験結果と良い一致を示していることが分かる。図47、図48および図49には，同じくナノ軟磁性材料を構成する Fe-Co-B、Fe-Nb-B および Fe-Zr-B3元系の縦断面状態図の計算結果を示す。このような第一原理計算を援用した熱力学的解析により、ナノ軟磁性材料系の熱力学データベースを構築した。

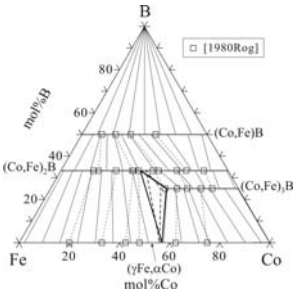


図47 Fe-Co-B3元系計算等温断面状態図(1273K)

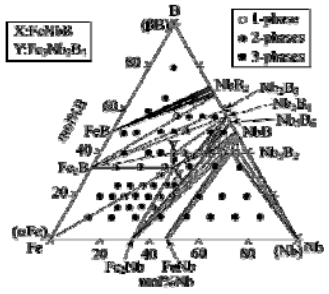


図48 Fe-Nb-B3元系計算等温断面状態図(1073K)

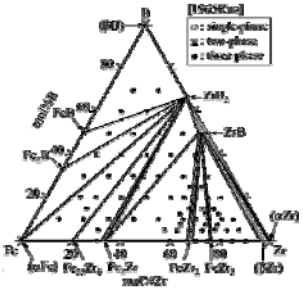


図49 Fe-Zr-B3元系計算等温断面状態図(1123K)

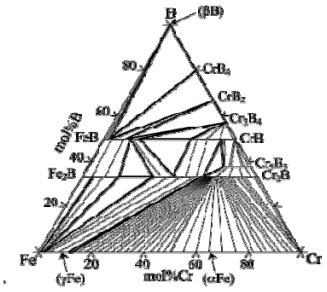


図50 Fe-Cr-B3元系計算等温断面状態図(1173K)

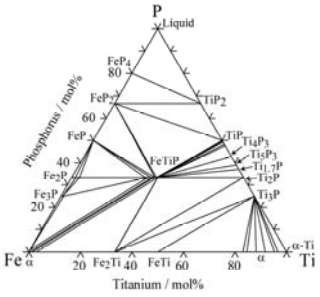


図51 Fe-Ti-P3元系計算等温断面状態図(1073K)

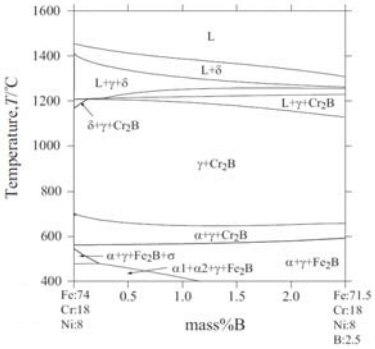


図52 Fe-Cr-Ni-B4元系計算縦断面状態図

状態図熱分析により、図50、図51および図52には，マイクロアロイング鋼を構成する状態図計算結果の一例として、Fe-Cr-B3元系およびFe-Ti-P3元系等温断面状態図、Fe-Cr-Ni-B4元系縦断面状態図をそれぞれ示す。第一原理計算によって得られた析出物の生成エネルギーをCALPHAD 法へ導入することで、特にホウ化物に着目したマイクロアロイング鋼の熱力学データベースを構築することができた。

(2) 研究成果の今後期待される効果

本研究で構築した「ナノ軟磁性材料」および「マイクロアロイング鋼」の熱力学データベースは、いずれも世界に先駆けたものであり、さらに第一原理計算を CALPHAD 法とカップリングする先駆的手法そのものも海外から注目を集めている。これらの熱力学データベースは、材料設計・開発のための基礎データを提供するとともに、組織形成シミュレーションへのデータ提供によりより優れた特性を有する材料創成に貢献できると考えられる。

3．6 鉄鋼の相変態シミュレーション（㈱豊田中央研究所グループ）

(1) 研究実施内容及び成果

① 研究のねらい

鉄鋼の幅広い強度特性を支配するミクロ組織は、高温安定相であるオーステナイト(γ)からの相変態によって形成される。相変態の速度論的研究は古くから行われてきたが、熱間加工された高強度部品の組織予測に活用された例は、これまでほとんどない。本研究では中炭素鋼素材の熱間鍛造品を対象に、その化学成分や冷却速度に応じて形態や速度が変化する相変態挙動(カイネティクス)の統合予測技術を構築した。

② 研究実施方法

中炭素鍛造用鋼は含有する炭素(C)量、マンガン(Mn)量が高く、従来の低炭素鋼モデルで主であったフェライト(α)のほか、炭化物(θ)との微細混合組織であるパーライト(*P*)、ベイナイト(*B*)への相変態を考慮する必要がある。対象鋼におけるこれら相変態の速度論的特徴に注目し、その核生成に関わるエネルギー条件、成長を支配する拡散現象の定式化を行った。計算に必要な熱力学量および拡散係数は、Fe-C-Si-Mn-Cr 系の全成分の影響を反映した CALPHAD 法による計算とし、実用鋼に対応させた。

これらを基礎とし、以下のように相変態の統合予測技術を開発した。

・ 第1段階として、初析αから*P* へ推移する等温変態のモデルを構築した。特に、初析αの成長は母相γの成分濃度を刻々変化させ、以後の変態挙動に大きく影響するので、既存モデルからの精度向上を主眼とした。

・ 第2段階では、より低温での *B* 変態の開始判定を統合し、一般的な連続冷却における初析α/*P*/*B* 比を計算できるようにした。最終的に、実用鍛造用鋼での実験と計算との比較検証を行い、開発ツールの有用性を評価した。

③ 研究成果

① CALPHAD 法とのカップリング　多成分系の相平衡や拡散係数の決定は、CALPHAD 法の代表的ソフトである Thermo-Calc と連成して計算する仕組みを作成した。特に鉄鋼の相変態で重要なパラ平衡（Mn など固相拡散の遅い合金元素が母相/変態相の間で分配できず、C のみ拡散して平衡した界面状態）を計算するため，スェーデン Thermo-Calc 社 Qing 博士により新規に作成された専用サブルーチンを使用した。同パラ平衡計算サブルーチン"TQGDF"は、Thermo-Calc 用プログラミングインターフェース TQ-i ver.6に組み込まれ、全ユーザが利用可能となった。

作成したプログラムでは、対象とする中炭素鋼の各成分が及ぼす熱力学的影響を厳密に計算することが可能である。特に，相変態カイネティクスを記述する最重要パラメータとして、母相γ内での C の拡散係数 D_C^{γ}、α 変態の核生成駆動力ΔG_m、および成長速度に関わるγ/α、γ/θ 界面の局所 C 濃度について、C と全ての合金元素との相互作用を考慮して計算する。図53に、⑤の実験検証で用いるSMn438相当鋼でMn濃度のみが0.2wt%増減した場合のγ/α 平衡を計算した結果を示す。このように、パラ平衡(PE)や後述する NPLE など、特殊平衡下にある界面のγ側、α側の各 C 濃度 $X_C^{\gamma/\alpha}$, $X_C^{\alpha/\gamma}$を、微小な成分濃度や温度の変化に対して知ることができる。

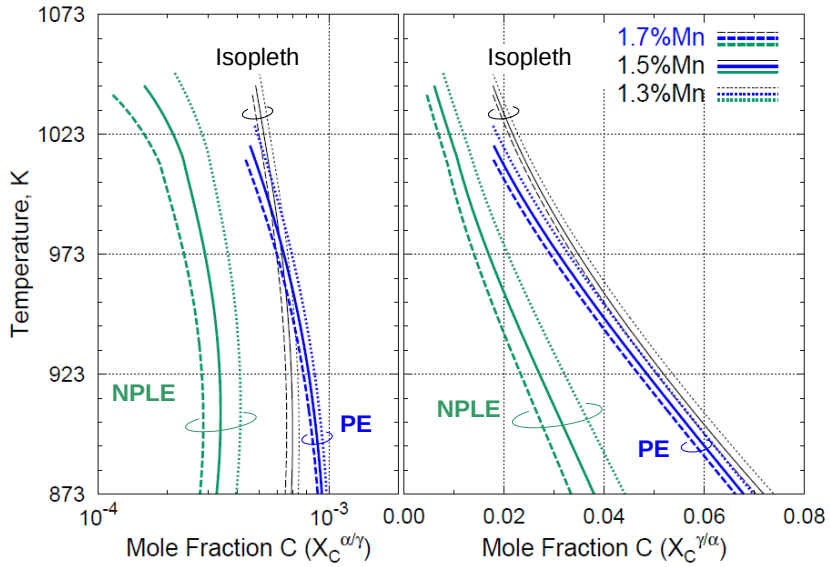


図53　SMn438 (0.39C-0.51Si-Mn-0.14Cr)のγ/α平衡におよぼすMn濃度の影響

② Mn を含有する中炭素鋼の初析フェライト変態モデル　スペイン国立金属研究所 Capdevila 博士との討議にもとづき，初析 α および *P* 変態の開始条件、核生成速度、成長速度から、それぞれの体積を計算するための各変態モデルを作成した。この中で，標記鋼の初析 α の成長速度に関して、新たな取り扱いを行った。

初析 α の成長は通常、γ へ排出される C の拡散律速過程として、速度定数　が(1)式で表される。

$$2\left(\frac{D_C^{\gamma}}{\pi}\right)^{1/2}\frac{X_C^{\gamma/\alpha}-X_C^{\gamma}}{X_C^{\gamma/\alpha}-X_C^{\alpha/\gamma}}=\alpha_1\,exp\left(\frac{\alpha_1^{\,2}}{4D_C^{\gamma}}\right)erf\left\{\frac{\alpha_1}{2D_C^{\gamma\,1/2}}\right\} \qquad (1)$$

$$X_C^{\gamma}(t+\Delta t)=\frac{X_C(t)-X_C^{\alpha/\gamma}\cdot V_f}{1-V_f} \qquad (2)$$

$X_C^{\gamma/\alpha}$, $X_C^{\alpha/\gamma}$は上記界面の C 濃度，X_C^{γ}は界面から離れた γ 内の C 濃度である。中炭素鋼は元来 C 濃度が高いため，γ 内の C 濃化によって成長が遅延する Soft Impingement 効果が顕著に表れる。そこで(2)式のように，微小時間刻みΔtの間の α 成長でわずかに増加した C 濃度 $X_C^{\gamma}(t+\Delta t)$を用い，α_iを逐次補正することで、時間の1/2乗則からの遅延を表現した。ここで V_f は，時刻 t までに変態した初析 α の累計体積率である。

また従来、γ/α 界面では終始、前述のパラ平衡(PE)が成立すると考えられてきたが，最近のナノレベル解析により、界面にそって Mn 等が数原子層の厚さで濃化する Negligible Partitioned Local Equilibrium(NPLE)の可能性も指摘されている。そこで初析 α 変態の後期に界面の移動速度　が低下し，νと Mn 拡散係数との比がスパイク厚さ～0.12nm を下回ると、PE から NPLE にシフトする新しいモデルを独自に考案した。これにより(1)式で X_C^{γ} だけでなく、$X_C^{\gamma/\alpha}$もある時間の経過後に減少し、さらに成長速度が減少する。

③ 初析フェライト→パーライト変態への移行　初析 α 変態に続いて *P* 変態が開始する熱力学条件は、上記 X_C^{γ}がさらに上昇して θ の安定域 $X_C^{\gamma/\theta}$ に達することである。γ 粒界から優先的に初析 α が成長するので、γ粒径が小さい部分ではC濃化の程度が大きく, *P* 変態が早く開始する。そこで、γ 粒径がほぼ対数正規分布を持つことを実験的に確認した後、2.5μm ごとの全粒径範囲に対して別々に X_C^{γ}を計算する離散的手法をとった。その他、*P* の核生成速度や成長速度の計算式は、Capdevila らのモデルにもとづいて構成した。
このように母相 γ 粒径の分布を考慮した結果、初析 α の停止と *P* の発生が同時進行する移行挙動とタイミングが, 実際と良く一致した。

④ ベイナイトを含む統合モデルの開発　以上の新しい取り扱いを骨子に、初析 α,*P* の体積率 V_f,V_Pの経時変化を計算するよう、モデルの統合を行った。なお、核生成速度の計算は古典的核生成理論にそったものであり、説明は省略する。
初析 α の形状はγ粒界にそって3倍の速度で成長する回転半楕円体、*P* はその α 表面から生成する半球体と仮定した。このような不均一核生成による生成物の、重なり合いを考慮した体積率を計算するため Cahn-梅本の積分手法を用い、まず等温変態を計算するアルゴリズムをプログラム化した。
さらに加算反応則（Additivity Rule）に従い、Δt ごとの等温ステップで冷却過程を表現することで, 連続冷却変態を計算できるようにした。対象の鍛造用鋼では初析 α→*P* 変態の完了前に500～550°C 以下に冷却されると、残った γ 部が *B* に変態することがある。そこでさらに、残 γ の C 濃度 X_C^{γ} に対して、Bhadeshia らの提唱する *B* 生成のためのエネルギーを計算し、鋼種によらないせん断型 *B* 変態を開始できる臨界温度を検出させた。この温度以下で残部は全て *B* 変態すると考えれば、目的とする最終の *B* 体積率を見積もることができる。
なお、X_C^{γ}が小さいほど *B* 変態の駆動力は高いため、対数正規分布に含まれる少数の粗大 γ 粒でわずかな *B* 変態の発生が予測できることが分り、このような特徴は観察からも裏付けられた。

⑤ モデルの実験的検証　相変態実験との比較により、開発モデルの計算予測精度と有用性を評価した。実験には3種の SMn438 相当鋼 (0.39C-0.51Si-Mn-0.14Cr) で、Mn 濃度のみ 1.3%,1.5%,1.7wt%と変動したものを用いた。γ 化のための加熱条件は1070℃x70s、等温変態の実験温度は650℃、連続冷却での冷却速度は10～100℃/分とした。相変態の途中で急冷したミクロ組織から、ポイントカウント法で α/*P*/*B* 体積率を定量化した。図54に等温変態を比較する。実験ではこのようなわずかな Mn 濃度の差がカイネティクスに大きく影響し、高 Mn 材ほど初析 α→*P* 変態の進行が遅くなっている。計算でも同じ傾向が予測され、実験とほぼ一致した結果が得られた。このように、本モデルは小さな組成変動に対して敏感であり、素材組成に応じた熱間加工条件の変更など、高度な製造管理を可能にする情報を与えることが分った。図55は、連続冷却変態完了時の初析 α/*P*/*B* の体積率に対する冷却速度(CR)の影響である。図のように CR が比較的大きい場合、計算では実際よりも初析 α が少なく、また *P* 変態の進行がやや早いなどの差異がある。一方70°C/分以下の CR においては、おおよそ初析 α/ *P*/*B* 比の変化を再現できている。基本的に初析 α+*P* 組織で使用する非調質の鍛造品では、切削加工性を悪化させる *B* を避ける必要があり、本結果の

ようなB発生の臨界冷却速度の予測は有用である。この点、開発モデルでの予測は概ね良好な精度があると考えられる。

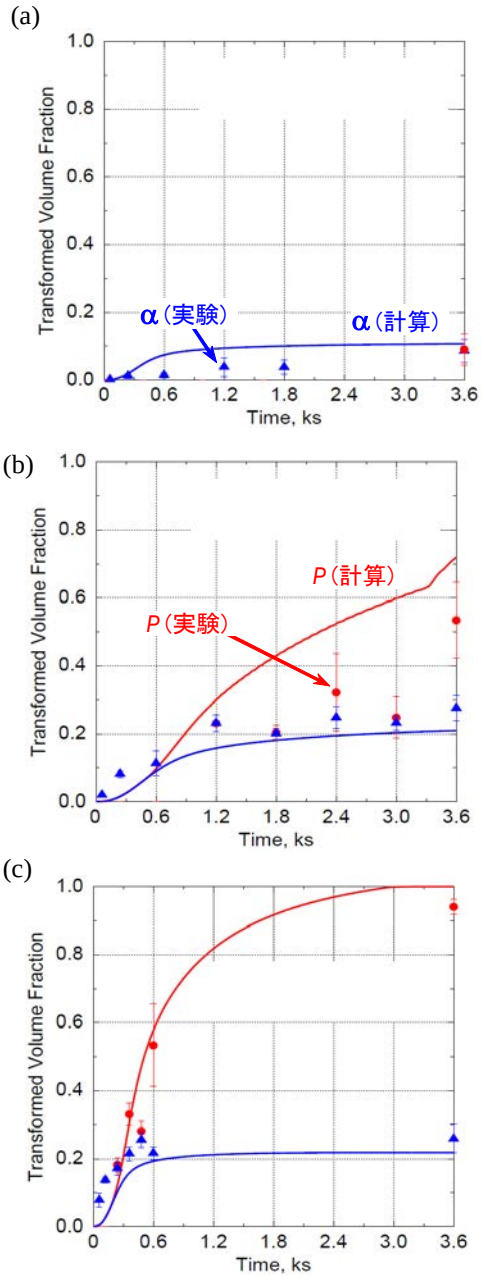


図54　650℃等温変態へのMn濃度の影響
(a) 1.3%Mn, (b) 1.5%Mn, (c) 1.7%Mn

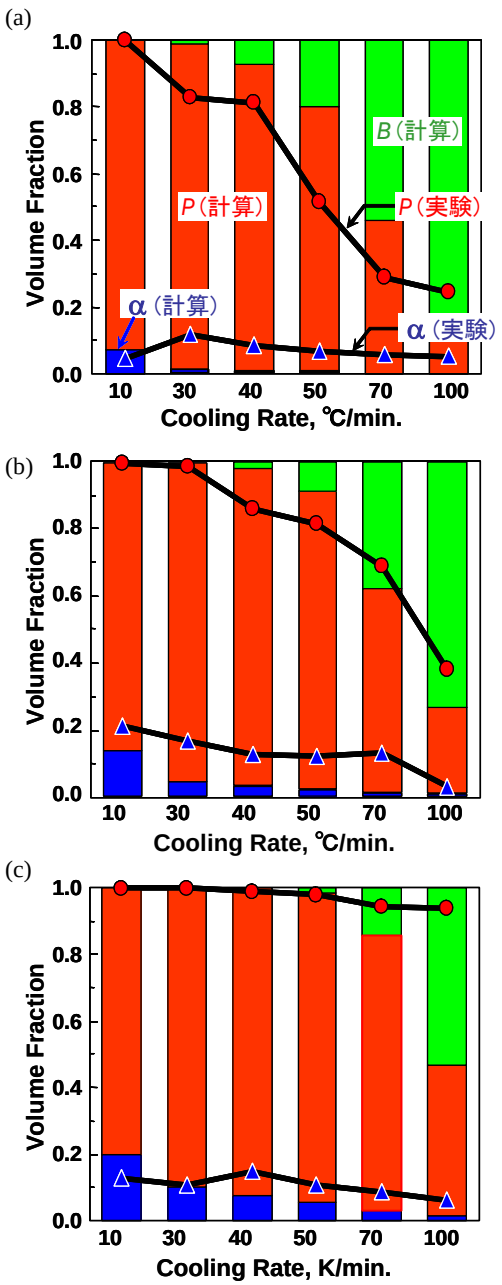


図55　最終α/P/B 率の冷却速度依存性
(a) 1.3%Mn, (b) 1.5%Mn, (c) 1.7%Mn

(2)　研究成果の今後期待される効果

熱間鍛造加工では有限要素法による熱と塑性変形の連成解析が進んでおり、この CAE 技術と連携した鍛造品全体のα/P/B 率分布シミュレーションへの展開が可能である。図56に例として、多段加工した模擬鍛造品の B 体積率を計算した結果を示す。軸対象の1/8モデルを作成して解析し

た空冷時の温度履歴をもとに、全700節点の初析 α→*P* 変態、*B* 変態開始を計算して3D 表示した。冷却の早い端部では *B* が多くなるなど、部位によるミクロ組織の差異を予測できており、鍛造形状や冷却条件の適正化に役立つツールになることが期待される。

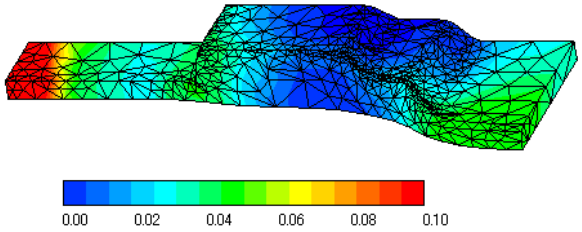


図56　模擬鍛造品のB率分布のシミュレーション（1/8モデル，1200°C鍛造→空冷）

国内では'80年代後半から'90年代初めに、各鉄鋼メーカーにおいて低炭素鋼を対象に相変態および強度特性予測が盛んに行われ、圧延鋼板のオンライン制御へ活用が試みられた。最近では，高強度 TRIP 鋼への注目が高まり、2相域焼鈍における α 変態、その後の *B* 変態と残留 γ との関係が、類似の計算技術を使って研究されている。

これに対して本研究は、強度部品として多用される中炭素鍛造用鋼が対象であり、素材を2次加工する部品製造業での活用を見込んでいる。上記のごとく鍛造品の α/*P*/*B* 分布を予測できれば、現在の試作開発にかかる時間と労力を大幅に削減できる。また、素材の化学組成変動に対応してミクロ組織を予測できる特徴は、今後のグローバルな生産において、部品強度の評価に貢献すると考えている。

3．7　Phase Field 法を用いた鋼の炭化物の組織形成に関するシミュレーション技術の確立（JFE スチール㈱グループ）

(1)　研究実施内容及び成果

①　研究のねらい

鉄鋼分野での Phase Field 法の適用事例を増やすとともに、組織計算から材質予測へと結びつけることを最終目標とする。本グループでは、Phase-Field 法を用いて炭化物の組織形成予測技術を確立することを目的とし、特に鉄鋼で重要な組織であるパーライトに焦点を当てた。研究の実施方法としては、まず、Phase-Field 法をパーライト変態(共析変態)の協調成長に適用し、変態温度に及ぼすラメラ間隔の影響等を、過去の実験データや解析モデルと比較した。次にパーライト組織の球状化過程に関して、実験と計算の両面からの検討を行った。

(a)　パーライト変態(共析変態)の協調成長の Phase-Field シミュレーション

②　実施方法

1)　計算方法

図57に、γ→α 変態を例にとり、計算方法の概略を示した。対象とする系全体に、スカラー関数である相の場 Φ(phase field parameter)を定義する。0≦Φ≦1 とし、Φ=0 を α 相、Φ=1 を γ 相とする。この Φ と濃度場 c の非線形発展方程式(1)と(2)をカップリングして同時に差分法で解く。界面領域の濃

度場は、(3)式のモデルを適用した。ここで、G:系の全自由エネルギー、M:拡散係数に関係する係数、L:界面易動度(mobility)に関係する係数である。

(1) Phase-Field 方程式 $$\frac{\partial c}{\partial t}=\nabla\cdot\left\{M\left[\nabla\frac{\delta G}{\delta c}\right]\right\}$$

(2) 拡散方程式 $$\frac{\partial \phi}{\partial t}=-L\left[\frac{\delta G}{\delta \phi}\right]$$

(3) 界面領域の濃度場 $$c=\Phi\cdot c_{\gamma}+(1-\Phi)c$$

③ 研究結果

phase field 法では、本質的に核生成は予測できないので、今回は初期核を配置し、そのラメラ間隔を変化させた場合(λ=0.15, 0.25, 0.4μm)のパーライト協調成長の挙動をシミュレーションした。過冷度 ΔT=10, 30, 50K を計算した。**図58**に Δ=30K の場合の計算例(γ 相内の C 拡散のみを考慮)を示す。λ=0.15μm の場合、ラメラ組織が形成されず、フェライトがセメンタイトに overgrow する挙動を示した。λ=0.25, 0.4μm ともラメラ組織を形成したが、0.25μm の方が協調成長の変態速度が大きくなった。これらの挙動は、従来知られた Zener-Hillert モデルと同様の傾向を示した。**図59**に各過冷度において最大速度を示すラメラ間隔の逆数(1/λ)を Square マークで示した。若干傾きは小さいものの、過去の実験データ(文献値)とほぼ同等の傾向を示した。phase field 法によるパーライト変態の協調成長が初めて再現された。

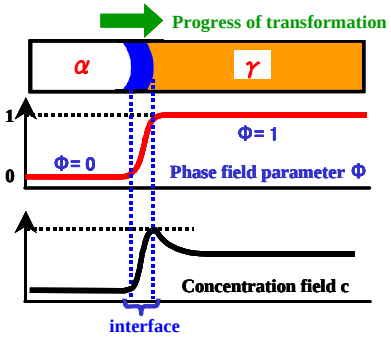


図57 計算モデル:結晶場と組成場

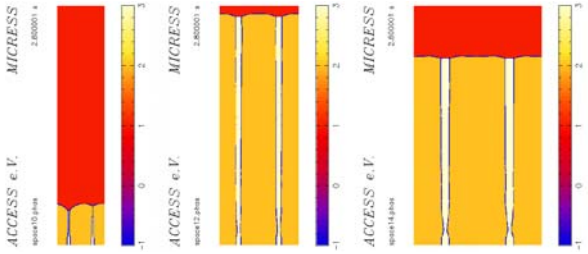


図58 協調成長におよぼすラメラー間隔(λ)の影響

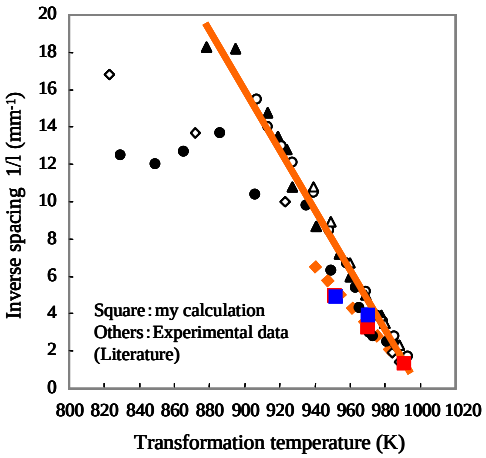


図59 温度とラメラー間隔の逆数との関係

(b) パーライト組織の球状化の phase field シミュレーション

② 実施方法 （計算方法および実験方法）

Phase Field 法は物材機構 Gr.のモデルに従い、熱力学データ、界面エネルギーなどの報告値を用いて計算パラメータの評価を行った.フェーズパラメータとしては，結晶度（非保存場；フェライト/セメンタイトの相を表すパラメータ）および炭素濃度（保存場）とした. このパラメータを用いて 10＊10μm を 200＊200 のサイトに分割して、セメンタイト層状組織の変化を調べた。実験では、Fe-3.7at%C および Fe-3.7at%C-0.3%at%X(X:Mn,Ni,Cr)を用いて、パーライト組織を有する熱延板を A1 点以下で球状化処理を行い SEM、TEMによる組織観察を行った。また、Aachen グループが開発している"MICRESS"と本プロジェクトで開発されたプログラムで球状化現象のベンチマーク計算を行い各計算手法の利点・問題点を明らかにした。

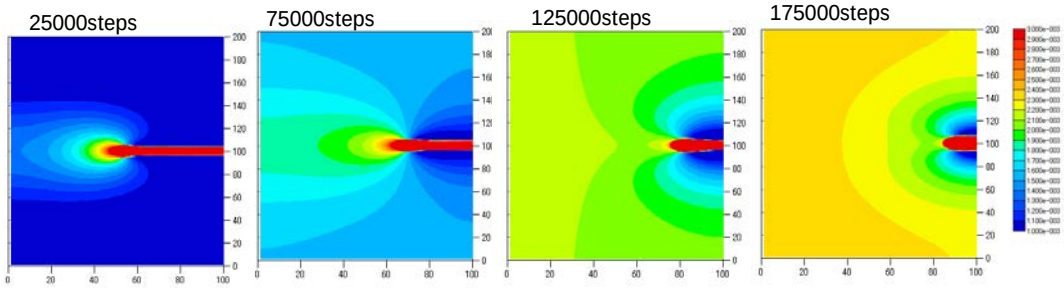


図60 球状化過程でのパーライト先端での炭素濃度分布

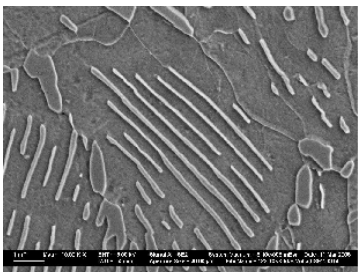


図61 球状化過程でのミクロ組織
(Fe-0.8%C, 710°C×1000sec)

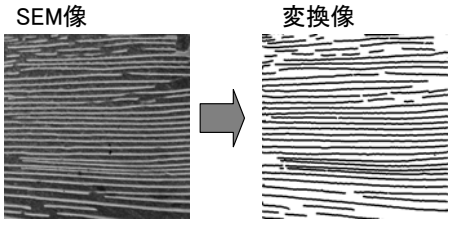


図62 パーライト組織の SEMN 像と変換後の計算入力組織

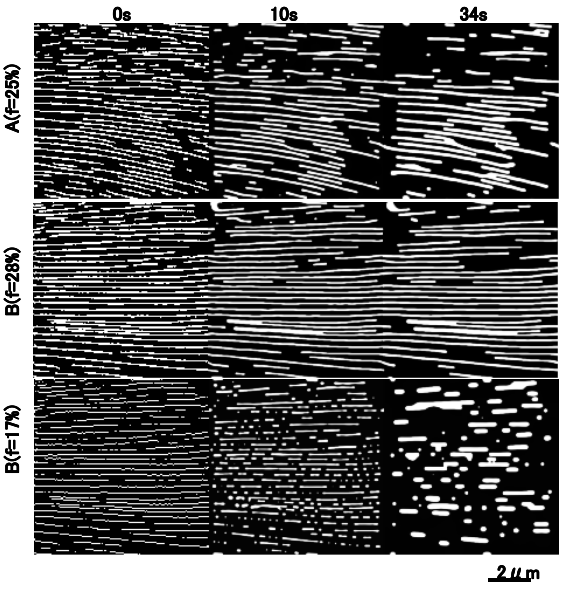


図63 実験的に得られた組織を初期組織としたパーライトの球状化計算組織

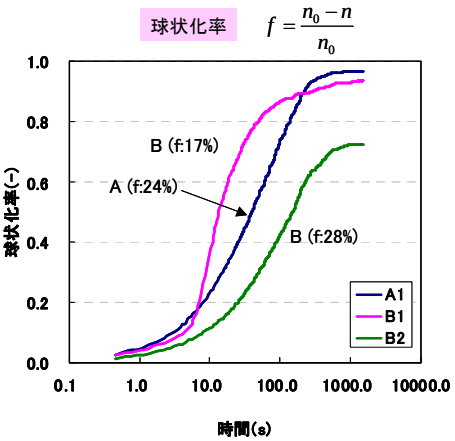


図64 球状化率に及ぼす初期組織の影響
n:界面サイト数

③ 研究結果

球状化過程でのセメンタイト先端の炭素の濃度マップを**図60**に示す。球状化途中において、実組織（**図61**）と同じように先端部が太くなることが観察された。このような曲率の変化は、セメンタイトとフェライトとの相平衡にも影響を与え、先端部の曲率に応じて Gibbs-Thomson 効果でセメンタイトのエネルギーが上昇して、平衡するフェライトの炭素濃度が上昇する。この炭素の供給状態によって先端部の形状が決定されていくと考えられる。

実用的に球状化時間を予測するためには,実際のパーライト初期組織の情報を入力して計算する必要があり、熱延板の SEM 組織写真を入力組織とする手法を使った。**図62**に SEM 像と、これをデジタル化し、入力組織に変換したものを示す。SEM により観察されるセメンタイトは腐食に状態により、実際よりも太く観察されるので、一旦組織をスケルトン化し、実際の分率に合うように初期セメンタイトの厚みを調整した。

この手法を用いて、球状化過程を計算した結果を**図63**に示す。図では、パーライトが分断されている試料Aと、欠陥の少ないラメラー組織となっている試料 B からの組織を出発組織として計算しており、試料Bについては初期セメンタイトの厚みを2水準にして計算した。ラメラー組織の分断されている先端より球状化が進むので試料Aの球状化時間は短い。但し、試料Bで初期セメンタイトの厚みを薄くしたものは欠陥部でない部分からもセメンタイトの分断が進行し、実際とは合わない結果となった。これは、計算組織の分解能に対して、初期セメンタイトが薄すぎたためであり、実際の初期セメンタイトの分率に合わせて球状化を計算するためにはさらに計算組織の分解能の調整が必要である。この組織を定量化するため、フェライトとセメンタイト界面のサイト数の減少率で球状化率を評価した。結果を**図64**に示す。同一セメンタイト分率で比較すると、パーライト組織の細かい組織の球状化の進行が早く，熱延段階でのパーライト組織の分断が，球状化時間の短縮化に有効であることを示唆している.

実材料では、Fe-C 以外の第３元素の存在が球状化時間を左右する。実際、Fe-3.72at% C-0.3%X(X:Mn,Cr,Ni)系の球状化率の変化は、**図65**に示すように第3元素により大きく変化し、特にCrは球状化を遅らせる。この第3元素の影響は、フェライト/セメンタイト界面での第3元素の拡散と分配による。このような元素の影響を簡便にデータベース化するため、 析出相（セメンタイト）の体積分率 f で発展方程式を評価した。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = M\nabla^2 \frac{\partial G}{\partial f}$$

$$G = W_{12} f^2 (1-f)^2 + \frac{1}{2}\kappa(\nabla f)^2$$

W12 と κ をフィッティングパラメータとして実験値との比較を行った。**図66**は Mn 系での結果である。このようにパーライト球状化における第3元素による易動度のデータベースの構築を可能とした。

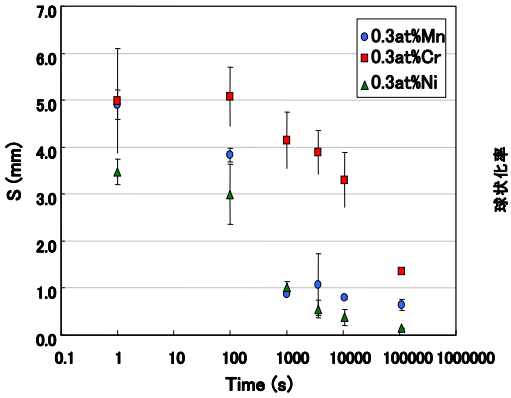


図65　単位面積あたりの界面長さの経時変化に及ぼす第3元素の影響

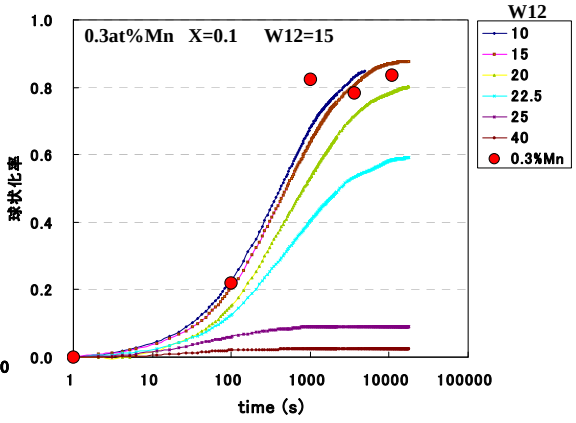


図66　FE-C-Mn 系での球状化率の変化と計算結果

(2) 研究成果の今後期待される効果

今回、パーライト組織形成から球状化に至るシミュレーション技術を確立したので、それらを統合し、さらに Mn,Cr などの第３元素の影響を取り込むことで、一般実用鋼の熱延組織から熱処理後組織の予測が可能になっていくと考えられる。また、球状化処理時間は長時間に及ぶので、熱延まま組織を最適化して、球状化処理時間を短縮させることは工業的にも重要になると考えられる。

§4 研究参加者

①東北大学石田グループ（熱力学データベース、拡散データベース構築及び力学的要素の導入法の開発の研究）

	氏 名	所 属	役 職	研究項目	参加時期
○	石田 清仁	東北大学大学院工学研究科	教授	総括	H15.10～H21.3
	安斎 浩一	東北大学大学院工学研究科	教授	流動・伝熱シミュレーション	H15.10～H21.3
	小池 淳一	東北大学大学院工学研究科	教授	無鉛はんだ合金の強度・変形シミュレーション	H15.10～H21.3
	貝沼 亮介	東北大学多元物質科学研究所	教授	拡散ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H15.10～H21.3
	及川 勝成	東北大学大学院工学研究科	准教授	熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築及び磁性材料シミュレーション	H15.10～H21.3
	大沼 郁雄	東北大学大学院工学研究科	准教授	熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H15.10～H21.3
＊	村上奈緒美	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	事務処理一般	H15.11～H18.3
＊	小林 恒誠	東北大学工学部技術部	CREST 研究員	磁性材料のシミュレーション	H15.12～H18.3
	小林 恒誠	東北大学工学部技術部	技術職員	磁性材料のシミュレーション	H18.4～H21.3
＊	佐藤 順	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	Co 基磁性材料のシミュレーション	H16.1～H18.9
＊	高久 佳和	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	ﾏｲｸﾛｿﾙﾀﾞｰ材のシミュレーション	H16.1～H18.3
＊	高久 佳和	東北大学大学院工学研究科	CREST 博士研究員	ﾏｲｸﾛｿﾙﾀﾞｰ材のシミュレーション	H18.4～H21.3
	八百川 盾	東北大学大学院工学研究科	助教	流動・伝熱シミュレーション	H16. 3～H19.9
	劉 興軍	中国厦門大学材料系	教授	はんだ、Cu 基合金熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H16.3～H21.3
＊	梅津 理恵	東北大学多元物質科学研究所	CREST 研究員	磁気特性ﾃﾞｰﾀの収集	H16.4～H18.3
	梅津 理恵	東北大学多元物質科学研究所	助教	磁気特性ﾃﾞｰﾀの収集	H18.4～H21.3
＊	近藤勇之進	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	電子顕微鏡による組織観察	H16.4～H20.3
＊	関口 貴子	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	有限要素法による材質予測	H16.4～H16.10
＊	神谷 尚秀	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H16.4～H18.3
＊	田中 優樹	東北大学金属材料研究所	研究補助員	強磁性形状記憶合金の研究	H16.5～H17.3

	田中　優樹	東北大学金属材料研究所	COE フェロー	強磁性形状記憶合金の研究	H17.4～H21.3
	山崎　仁丈	東北大学大学院工学研究科	助教	拡散ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H16.5～H21.3
	須藤　祐司	東北大学大学院工学研究科	准教授	強磁性形状記憶合金	H16.5～H21.3
	王　　翠萍	中国厦門大学材料系	教授	Co 基合金の熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ	H16.6～H21.3
＊	Farjami Susan	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	強磁性形状記憶合金の研究	H16.10～H18.3
＊	津金　容造	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	はんだ、Cu 基合金の研究	H17.4～H19.3
＊	萩澤　武仁	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	組織変化のｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ	H17.4～H20.3
＊	伊東　　航	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	メタ磁性材料の研究	H18.4～H19.3
	伊東　　航	東北大学大学院工学研究科	D3	メタ磁性材料の研究	H18.4～H21.3
	高木　隆光	東北大学大学院工学研究科	D3	磁性材料の研究	H18.4～H20.6
	大森　俊洋	東北大学大学院工学研究科	助教	強磁性形状記憶合金の研究	H16.10～H21.3
	蒋　　敏	中国東北大学材料系	教授	Cu 基及び Co 基熱力学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ構築	H17.4～H19.8
	Ducher Roland	東北大学大学院工学研究科	外国人研究者	強磁性形状記憶合金の相安定	H17.4～H18.2
＊	鎌倉恵美子	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	事務処理一般	H18.4～H21.3
＊	王　　建軍	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	磁性記録材料の研究	H18.5～H20.4
＊	阿部由紀恵	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	研究データの収集	H18.6～H21.3
	寺田賢二郎	東北大学大学院工学研究科	准教授	有限要素法による機械的性質の評価	H18.11～H21.3
	長迫　実	東北大学大学院工学研究科	特別教育研究教員	磁気特性ﾃﾞｰﾀの収集	H18.11～H21.3
	森戸　春彦	東北大学大学院工学研究科	助教	強磁性形状記憶合金	H19.4～H21.3
	崔　予文	東北大学大学院工学研究科	研究支援者	拡散データベースを構築	H18.11～H19.9
＊	崔　予文	東北大学大学院工学研究科	CREST 研究員	拡散データベースを構築	H19.10～H20.5
＊	石川　博康	東北大学大学院工学研究科	研究補助員	Pd-In 基形状記憶合金の研究	H19.4～H20.3
	石川　博康	東北大学大学院工学研究科	D2	Pd-In 基形状記憶合金の研究	H20.4～H21.3
＊	知念　響	東北大学大学院	研究補助員	Co 基合金の研究	H19.4～H20.5

		工学研究科			
	知念　響	東北大学大学院 工学研究科	D2	Co 基合金の研究	H20.6～H21.3
	友重　竜一	東北大学大学院 工学研究科	准教授	燃焼合成法の研究	H19.4～H21.3
	山内　清	東北大学大学院 工学研究科	客員教授	形状記憶合金の研究	H19.5～H21.3
	古川　明久	東北大学大学院 工学研究科	研究支援者	合金のミクロ組織観察	H20.4～H21.3
	Ibrahim Karaman	ﾃｷｻｽ A&M 大学	准教授	強磁性形状記憶合金の研究	H20.4～H21.3
	Burak Basaran	ﾃｷｻｽ A&M 大学	D3	強磁性形状記憶合金の研究	H20.4～H21.3

②（独）物質・材料研究機構グループ（Phase-Field 法による組織形成過程のモデル化及び組織・特性予測、合金組成自動検索システムの開発研究）

	氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
○	小野寺秀博	（独）物質・材料研究機構	ｸﾞﾙｰﾌﾟﾘｰﾀﾞｰ	相平衡解析と統合化システム設計	H15.10～H21.3
	小山　敏幸	（独）物質・材料研究機構	主幹研究員	組織・特性計算システムの開発	H15.10～H21.3
	阿部　太一	（独）物質・材料研究機構	主任研究員	平衡状態図データベースの構築	H15.10～H21.3
	片桐　昌彦	（独）物質・材料研究機構	主任研究員	物質パラメータの数値計算	H17.4～H21.3
	諏訪　嘉宏	（独）物質・材料研究機構	特別研究員	多結晶組織形成シミュレーション	H18.4～H20.3
	大出真知子	（独）物質・材料研究機構	研究員	鉛フリーはんだの凝固シミュレーション	H15.10～H21.3
＊	橋本　　清	（独）物質・材料研究機構	CREST 研究員	合金組成自動探索システムの開発	H16.1～H21.3

③九州工業大学グループ（ナノ軟磁性材料およびマイクロアロイング鋼の熱力学データベース構築）

	氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
○	長谷部　光弘	九州工業大学 工学研究院	教授	熱力学的解析	H15.10～H21.3
	大谷　博司	九州工業大学 工学研究院	教授	熱力学的解析 第一原理計算	H16.10～H21.3
＊	徳永　辰也	九州工業大学 工学研究院	CREST 研究員	熱力学的解析	H16.8～H18.11
	徳永　辰也	九州工業大学 工学研究院	助教	熱力学的解析	H18.12～H21.3

③(株)豊田中央研究所グループ(鉄鋼の相変態シミュレーションの研究)

	氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
○	中西　広吉	㈱豊田中央研究所 材料基盤研究部・金属成形研究室	室長	相変態予測モデル作成	H15.10～H21.3
	田中　浩司	㈱豊田中央研究所 材料基盤研究部・金属成形研究室	主任研究員	相変態予測モデル作成、実験検証、Phase-field 法	H15.10～H21.3
	斉藤　卓	㈱豊田中央研究所	所長	相変態予測モデル作成	H15.10～H19.3
	池畑　秀哲	㈱豊田中央研究所 材料基盤研究部・金属成形研究室	研究員	Phase field 法応用	H16.7～H21.3
	松岡　秀明	㈱豊田中央研究所 材料基盤研究部・金属成形研究室	研究員	Phase field 法応用	H16.7～H19.3
	原　昌司	㈱豊田中央研究所 材料基盤研究部・粉末冶金・接合研究室	研究員	実験検証	H16.7～H19.3

③JFEスチール(株)グループ(Phase Field シミュレーションの適用研究)

	氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
○	長滝　康伸	JFEｽﾁｰﾙ㈱・ｽﾁｰﾙ研究所・自動車鋼板研究部	ｸﾞﾙｰﾌﾟﾘｰﾀﾞｰ	鉄鋼材料のシミュレーション	H18.12～H21.3
	山下　孝子	JFEｽﾁｰﾙ㈱・ｽﾁｰﾙ研究所・分析・物性研究部	主任研究員	鉄鋼材料のシミュレーション	H16.4～H21.3
	奥田　金晴	JFEｽﾁｰﾙ㈱・ｽﾁｰﾙ研究所・自動車鋼板研究部	主任研究員	鉄鋼材料のシミュレーション	H16.4～H21.3
	中島　　勝己	JFEｽﾁｰﾙ㈱・ｽﾁｰﾙ研究所・自動車鋼板研究部	主任研究員	鉄鋼材料のシミュレーション	H17.8～H21.3
	占部　俊明	JFEｽﾁｰﾙ㈱・ｽﾁｰﾙ研究所・セクター一部	主任部員	鉄鋼材料のシミュレーション	H16.4～H17.9

§5 招聘した研究者等

氏　名(所属、役職)	招聘の目的	滞在先	滞在期間
Burak Basaran (米国テキサス A&M 大学、大学院生)	NiCoMnIn 合金などの磁性形状記憶合金に複合外場下で生じるマルテンサイト相の結晶構造を決定し単一外場下で生じる通常の変態の結果と比較する.	仙台	H21.2.17～ H21.3.8

Ibrahim Karaman （米国テキサス A&M 大学、準教授）	NiCoMnIn 合金などの磁性形状記憶合金に複合外場下で生じるマルテンサイト相の結晶構造を決定し単一外場下で生じる通常の変態の結果と比較する.	仙台、大阪、つくば	H20.5.17～ H20.6.1
Burak Basaran （米国テキサス A&M 大学、大学院生）	NiCoMnIn 合金などの磁性形状記憶合金に複合外場下で生じるマルテンサイト相の結晶構造を決定し単一外場下で生じる通常の変態の結果と比較する.	仙台、大阪、つくば	H20.5.17～ H20.6.1
Kurt. R. A. Ziebeck （英国ラフバラ大学、教授	強磁性形状記憶合金の磁気及び結晶構造解析に関する共同研究の成果発表講演、並びにワークショップでの講演、今後の共同研究に関する打ち合わせ。	東京、京都、仙台	H18.8.16～ H18.9.1
Qing Chen (Thermo-Calc Software)	専用ライブラリの仕様についての打合せ	豊田中央研究所 名古屋市内 (宿)	H16.11.15～ H16.11.17
Carlos Capdevila (CENIM:スペイン国立金属研究所)	基本的な相変態モデリングの要素についての討議	豊田中央研究所 名古屋市内 (宿)	H1611.27～ H16.12.3

§6 成果発表等

（1） 原著論文発表 （国内(和文)誌 42件、国際(欧文)誌 192件）

国内(和文)誌

1. 荒木慶一，木村寛之，聲高裕治，大森俊洋，須藤祐司,"建築用ダンパー材料としてのCu-Al-Mn 超弾性合金の機械的性質"，銅と銅合金，第 47 巻 1 号 (2008)
2. 田畑伸子，石橋昌也，末武茂樹，大森俊洋，須藤祐司，貝沼亮介，山内清，石田清仁，"新しい形状記憶合金製矯正器具による陥入爪の治療 "，皮膚科の臨床，50 (4)，pp491-496 (2008)
3. 徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"CALPHAD 法援用による合金のアモルファス形成能評価"，熱測定, 35, pp200-208 (2008)
4. 寺田賢二郎，犬飼壮典，平山紀夫，"非線形マルチスケール材料解析における数値材料実験 "，機械学会論文集(A 編)，第 74 巻，第 744 号, pp1084-1094 (2008)
5. 渡邊育夢，寺田賢二郎，"Eduardo Alberto de Souza Neto, Djordje Peric"，多結晶金属のマルチスケール解析によるマクロ材料特性評価における有限要素の性能"，応用力学論文集，土木学会, Vol.10, pp167-174 (2007)
6. 渡邊育夢，寺田賢二郎，秋山雅義，"結晶塑性・損傷マルチスケール解析による多結晶金属の引張強度の結晶粒径への依存性評価"，日本機械学会論文集（A 編），74，739，pp412-418 (2007)
7. 中島一喜，徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"Be-Mo2元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会誌, 71, pp187-189 (2007)
8. 浮田周佑，大谷博司，長谷部光弘，"Ti-H および Zr-H2元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会誌, 71, pp721-729 (2007)
9. 大森俊洋，肥田直樹，須藤祐司，貝沼亮介，石田清仁，"Cu-Al-Mn-Ni 形状記憶合金の超塑性"，銅と銅合金，第 45 巻 1 号, pp282-286 (2006)
10. 小山敏幸，"Phase-field 法の最近の発展とメソスコピック組織研究の実効的指針，分子シミュレーション研究会会誌，アンサンブル", Vol.8, pp20-25 (2006)
11. 橋本清，"市販状態図計算ソフトウェア Pandat の紹介と研究者個人によるそのデータベースの操作方法"，ふぇらむ, No11, pp715-721 (2006)
12. 西村雅俊，徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"Be-Ti-V3元系における相平衡の熱力学的計算"，日本金属学会誌, 70, pp122-125 (2006)
13. 徳永辰也，松本智史，大谷博司，長谷部光弘，"Nb-Ni-Zr 系における相平衡の熱力学的解析"，日本金属学会誌, 70, No.9, pp741-749 (2006)
14. 大谷博司，長谷部光弘，"析出物の溶解度の熱力学"，ふぇらむ, 11, 457-463 (2006)
15. 長谷部光弘，"異相界面での各種平衡モードを考慮した相変態の熱力学と状態図"，ふぇらむ, 11, pp349-353 (2006)
16. 小野寺秀博，"状態図（相変態編）－自信を持って使うための熱力学基礎序文－"，ふぇらむ, 11, 5, pp291-293 (2006)
17. 阿部太一，"－状態図（相変態編）－自信を持って使うための熱力学基礎－6，状態図計算プログラムの解説"，ふぇらむ, 11, 8, pp520-527 (2006)

18. 大出真知子, 小野寺秀博, "鉛フリーはんだ凝固組織の計算機シミュレーション", まてりあ, 45, 5, pp353 (2006)

19. 小山敏幸, "状態図（相変態編）－自信を持って使うための熱力学基礎－6, 状態図から組織形成シミュレーションへ", ふぇらむ, 11, 10, pp647-65 (2006)

20. 小山敏幸, 第7章, ナノ金属設計 第3節, Phase-field 法", ナノマテリアル工学大系, 第2巻, ナノ金属", フジテクノシステム, pp458-464 (2006)

21. 小山敏幸(分担執筆), "ナノシミュレーション技術ハンドブック", 共立出版, pp84-89 (2006)

22. 大森俊洋, 王継傑, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "マルテンサイト変態制御による新しいタイプの Cu 基インバー合金の開発", 銅と銅合金, Vol.44, No.1, pp149-154 (2005)

23. 貝沼亮介, 石田清仁, "Fe/Zn 拡散に形成される化合物層の組織", 鉄と鋼, 91, pp349-355, (2005)

24. 小山敏幸, "Phase-field 法による組織形成シミュレーションの最前線", 日本機械学会誌, Vol.108, pp794 (2005)

25. 大谷博司, 長谷部光弘, "第一原理-CALPHAD法を用いた準安定平衡状態図の計算", まてりあ, 44, pp395-402 (2005)

26. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "アモルファスと状態図", 金属, 75, pp529-534 (2005)

27. 大道雅幸, 里昌英, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "鉄系クラッド材の界面における拡散挙動", 日本金属学会誌, 68, No.12, pp1013-1019 (2004)

28. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "CALPHAD 法を援用した Ni-Si-B3元合金のアモルファス形成能の評価", 日本金属学会誌, 68, No.12, pp1002-1007 (2004)

29. 大谷博司, 長谷部光弘, "第一原理計算を援用した状態図の熱力学的解析", ふぇらむ, 9, pp223-229 (2004)

30. 小山敏幸, 小野寺秀博, "Phase-field 法に基づくFePt微粒子規則化に対するサイズ依存性の解析", 日本金属学会誌, 68, pp1008-101 (2004)

31. 小山敏幸, "組織形成予測に対する計算工学的手法の開発状況と今後の課題", 材料の組織と特性部会・創形創質工学部会共同シンポジウム「鉄鋼材料の製造段階から製品に至るまでのナノ・ミクロ・メゾ・マクロスケール組織に基づいた材質予測技術の現状と課題－最終目標としての一貫材質予測プログラムの構築に向けて－」予稿集, pp21-30 (2004)

32. 小山敏幸, "Phase-field 法を用いた材料組織形成のモデル化", ふぇらむ, 9, pp905-910 (2004)

33. 小山敏幸, "Phase-field 法に基づく組織形成過程の計算機シミュレーション", 日本鉄鋼協会、第 180,181 回西山記念技術講座「鉄鋼材料の組織と材質予測技術」, pp48-71 (2004)

34. 小山敏幸, "入門講座 計算組織学の基礎と応用1）非線形発展方程式の基礎", ふぇらむ, 9, pp240-245 (2004)

35. 小山敏幸, "入門講座 計算組織学の基礎と応用2）組織の全自由エネルギーの評価法(1)", ふぇらむ, 9, pp301-305 (2004)

36. 小山敏幸, "入門講座 計算組織学の基礎と応用3）組織の全自由エネルギーの評価法(2)", ふぇらむ, 9, pp376-381 (2004)

37. 小山敏幸, "入門講座 計算組織学の基礎と応用4）組織形成モデリングと材料設計の考え方", ふぇらむ, 9, pp497-503 (2004)

38. 小野寺秀博, "計算材料科学の現状, 鉄鋼材料の製造段階から製品に至るまでのナノ・ミクロ・メゾ・マクロスケール組織に基づいた材質予測技術の現状と課題", pp11-20 (2004)

39. 小野寺秀博, "計算材料科学の進展", ふぇらむ, 9, 12, pp861-866 (2004)

40. 大出真知子, "フィレットリフティングはなぜ起こるのか", 金属, 74, 12, pp1263-1266 (2004)

41. 小山敏幸, "Phase-field 法に関する最近の進展と今後の展望", 日本金属学会会報まてりあ, 42, pp397-404 (2003)

42. 小山敏幸, "相変態シミュレーションを利用した自己組織形成の解析", 日本金属学会会報まてりあ, 42, pp470-474 (2003)

国際(欧文)誌

1. K. Tanaka, Y. Yogo, K. Nakanishi and C. Capdevila, "Prediction of Bainite Intervention in Ferrite-Pearlite Forging Steel / I. Modeling", Material Transactions, 50, No.3, pp551-555 (2009)
2. K. Tanaka, M. Hara, K. Nakanishi and C. Capdevila, "Prediction of Bainite Intervention in Ferrite-Pearlite Forging Steel II. Experimental validation", Material Transactions, 50, No.3, pp556-561 (2009)
3. S. Ukita, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the V-H Binary Phase Diagram", Materials Transactions, 49, (2008) in press
4. T. Tokunaga, K. Terashima, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Phase Equilibria in the Fe-Zr-B System", Materials Transactions, 49, (2008) in press
5. T. Kanomata, T. Yasuda, S. Sasaki, H. Nishihara, R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa, K. Ishida, K.-U. Neumann, and K.R.A. Ziebeck : "Magnetic Properties on Shape Memory Alloys $Ni_2Mn_{1+x}In_{1-x}$" J. Magn. Magn. Mater., in press
6. Ryosuke Kainuma, Katsunari Oikawa, Wataru Ito, Yuji Sutou, Takeshi Kanomata and Kiyohito Ishida : "Metamagnetic shape memory effect in NiMn-based Heusler-type alloys" J. Mater. Chem., 18 (2008) 1837.
7. R. Kainuma, W. Ito, R. Y. Umetsu, K. Oikawa, and K. Ishida : "Magnetic field-induced reverse transformation in B2-type NiCoMnAl shape memory alloys" Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 091906
8. R. Y. Umetsu, W. Ito, K. Ito, K. Koyama, A. Fujita, K. Oikawa, T. Kanomata, R. Kainuma and K. Ishida :" Anomaly in entropy change between parent and martensite phases in the $Ni_{50}Mn_{34}In_{16}$ Heusler alloy" Scr. Mater., 60 (2009) 25.
9. W. Ito, M. Nagasako, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, T. Kanomata and K. Ishida : "Atomic ordering and magnetic properties in the $Ni_{45}Co_5Mn_{36.7}In_{13.3}$ metamagnetic shape memory alloy" Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 232503.
10. R. Ducher, R. Kainuma, K. Ishida, "Phase equilibria in the Ni–Fe–Ga alloy system", Journal of Alloys and Compounds 463 pp.213-219 (2008)
11. W. Ito, M. Nagasako, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, T. Kanomata and K. Ishida, "Atomic ordering and magnetic properties in the $Ni_{45}Co_5Mn_{36.7}In_{13.3}$ metamagnetic shape memory alloy", APPLIED PHYSICS LETTERS 93, pp.232503-1-3 (2008)
12. R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma and K. Ishida, "Magnetic properties and stability of $L2_1$ and B2 phases in the Co_2MnAl Heusler alloy", J. of Appl. Phys. 103, pp.07D718-1-3 (2008)

13. **H. Ishikawa, R.Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma and K. Ishida,"** Atomic ordering and magnetic properties in $Ni_2Mn(Ga_xAl_{1-x})$ Heusler alloys**", Acta Materialia Vol. 56 17,** pp.**4789-4797 (2008)**

14. Y. W. Cui, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Computional Study of Atomic Mobility in Co-Fe-Ni Ternary Fcc Alloys", J. of Phase Equilibria and Diffusion Vol. 29 No. 4, pp.312-321 (2008)

15. Masaya Ishibashi, Nobuko Tabata, Takaki Suetake, Toshihiro Omori, Yuji Sutou, Ryosuke Kainuma, Kiyoshi Yamauchi and Kiyohito Ishida, "A simple method to treat an ingrowing toenail with a shape-memory alloy device", J. of Dermatological Treatment, pp.19:291-292 (2008)

16. Kouhei Ito, Wataru Ito, Rie Y. Umetsu, Makoto Nagasako, Ryosuke Kainuma, Asaya Fujita, Katsunari Oikawa and Kiyohito Ishida, "Martensitic Transformation in NiCoMnSn Metamagnetic Shape Memory Alloy Powders", Materials Transactions, Vol. 49, No. 8 pp.1915-1918 (2008)

17. Akinari Okubo, Rie Y. Umetsu, Makoto Nagasako, Asaya Fujita, Ryosuke Kainuma and Kiyohito Ishida, "Phase stability and magnetic properties of $Co_2(Ti_{1-x}Fe_x)Ga$ Heusler alloys", Scripta Materialia 59, pp.830-833 (2008)

18. Takehito Hagisawa, Hajime Mitsui, Ikuo Ohnuma, Ryosuke Kainuma and Kiyohito Ishida, "Effects of Liquid Bi Particles on Grain Growth of Fe–1.9vol%Bi Alloy ", ISIJ International vol. 48, No. 7, pp1001-1007 (2008)

19. K. Shinagawa, T. Omori, J. Sato, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and Microstructure on γ' Phase in Co-Ni-Al-W System", Materials Transactions, Vol. 49, No. 6, pp1474-1479 (2008)

20. C. P. Wang, Y.F. Li, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic Assessment of Cu-Th and Mo-Th systems" J. Alloys & Compounds, Vol.457, pp150-156 (2008)

21. C. P. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Self-formed Pencil-like Bulk Composite Materials Consisting of Copper Alloy and Stainless Steel", Journal of Materials Research, Vol.23, pp933-940 (2008)

22. F. Gao, C.P. Wang, X.J. Liu, K. Ishida, "Thermodynamic Assessment of Phase Equilibria in the Sn-Ag-Ni System with Key Experimental Verification", Journal of Electronic Materials, Vol.37, pp279-287 (2008)

23. X.J. Liu, F. Gao, C.P. Wang and K. Ishida, "Thermodynamic Assesment of the Ag-Ni binary and Ag-Cu-ni Ternary Systems", J. of Electronic Materials, Vol. 37, pp210-217 (2008)

24. C.P. Wang, J. Wang, X.J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic assessment of the Co-La and Mo-La system", J. Alloys & Compounds, Vol. 453, pp174-179 (2008)

25. V. Khovaylo, R. Kainuma, K. Ishida, T. Omori, H. Miki, T. Takagi and A. Datesman, "New aspects of martensite stabilization in Ni-Mn-Ga high-temperatureshape memory alloy", Philosophical Magazine, Vol.88, No.6, 21 pp865-882 (2008)

26. T. Kanomata, K. Fukushima, H. Nishihara, R. Kainuma, W. Itoh, K. Oikawa, K. Ishida, K.-U. Neumann and K.R.A. Ziebeck, "Magnetic and Crystallographic Properties of Shape Memory Alloys $Ni_2Mn_{1+X}Sn_{1-X}$", Material Science Forum, Vol.583, pp119-129 (2008)

27. R.Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase stability and magnetic properties of $L2_1$ phase in $Co_2Mn(Al_{1-x}Si_x)$ Heusler alloys", Scripta Materialia 58 pp723-726 (2008)

28. Y. Murakami, D. Shindo, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida, "Macroscopic pattern formation preceding martensitic transformation in a ferromagnetic shape memory alloy $Ni_{51}Fe_{22}Ga_{27}$", Appl. Phys. Lett., 92, pp102512-1-3 (2008)

29. Y.-W. Cui, M. Jiang, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Computional Study of Atomic Mobility for fcc Phase of Co-Fe and Co-Ni Binaries", J. of Phase Equilibria and Diffusion, Vol.29, No.1, pp2-10, (2008)

30. R. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma and K. Ishida, "Magnetic properties, phase stability, elecytonic structure, and half-metallicity of $L2_1$-type $Co2(V_{1-x}\ Mn_x)Ga$ Heusler alloys", PHYSICAL REVIEW, B77, pp104422-1-104422-8, (2008)

31. Y. Takaku, I. Ohnuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Bi-Base Composite Solders for mountain Semiconductor", J. of Japan Institute of Electronics, Vol.11, No.2, pp11141-146, (2008)

32. T. Koyama, "Phase-field modeling of microstructure evolutions in magnetic materials", Sci. and Technol. Of Adv., Mater., 9, pp.013006-1-013006-9, (2008)

33. E. Mabruri, S. Sakurai, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, "Diffusion of Re and Ru in the γ′ phase of Ni based alloys ", Materials Transactions, 49, pp. 1441-1445, (2008)

34. E. Mabruri, S. Sakurai, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, "Diffusion and γ′ phase coarsening kinetics in ruthenium containing nickel based alloys ", Materials Transactions, 49, pp.792-799, (2008)

35. S. Sakurai, E. Mabruri, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, "Diffusion of refractory elements in Ni - X - y (X, Y: Co, Re, Ru, W) ternary alloys", Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum, 273-276, pp. 572-576, (2008)

36. Y. Murata, S. Sakurai, E. Mabruri, T. Koyama, M. Morinaga, "Cross interdiffusion coefficients in nickel- and iron-based ternary alloys", Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum 273-276, pp. 419-424(2008)

37. K. Yamashita, T. Kunieda, K. Takeda, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, "Diffusion of refractory elements in ternary iron alloys ", Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum 273-276, pp. 746-751(2008)

38. Y. Tsukada, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, "Phase-field simulation on the formation and collapse processes of the rafted structure in Ni-based superalloys ", Materials Transactions 49, pp. 484-488, (2008)

39. K. Takeda, K. Yamashita, Y. Murata, T. Koyama, M. Morinaga, " Interdiffusion of refractory elements in Fe-Cr-X (X-Mo, W) and Fe-Mo-W ternary iron alloys", Materials Transactions 49, pp. 479-483, (2008)

40. M. Ode, T. Abe, H. Murakami, Y. Yamabe-Mitarai, T. Hara, K. Nagasio, G. Kocer, H. Onodera", An investigation of the phase diagram of the Al - Ir binary system", Intermetallics,16, pp.1171-1178, (2008)

41. N. Garimella, M. Ode, M. Ikeda, H. Murakami, Y. H. Sohn , "Effects of Ir or Ta Alloying

Addition on Interdiffusion of L12 - Ni3Al", Intermetallics, 16, pp.1095-1103, (2008)

42. M. Ode, N. Garimella, M. Ikeda, H. Murakami, "Ternary Interdiffusion in L12-Ni3Al with Ir Alloying Addition", Defect and Diffusion Forum, 273-276, pp.637-642, (2008)

43. K. Cai, M. Ode, H. Murakami, "Reaction kinetics in the combustion synthesis of Al-Ir-Ni intermetallic compounds", J. of Mater. Res., 23, pp.1953-1960, (2008)

44. T. Abe, C. Kocer, M. Ode, H. Murakami, Y. Yamabe-Mitarai, K. Hashimoto, H. Onodera, "Thermodynamic re-assessment of the Al - Ir system",CALPHAD-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 32, pp.686-692, (2008)

45. 14. Y; Suwa, Y. Saito; H. Onodera, "Phase-field simulation of recrystallization based on the unified subgrain growth theory",Computational Mater. Sci., 44,pp.286-295,(2008)

46. Taichi Abe, Ying Chen, Yoko Yamabe-Mitarai, Hiroshi Numakura", Cobmined Ab-initio / CALPHAD modeling of order-disorder transition in the Ir-Nb system", CALPHAD, 32, pp353-360 (2008)

47. Y; Suwa, Y. Saito; H. Onodera, "Parallel computer simulation of three-dimensional grain growth using the multi-phase-field model", Materials Transactions, Vol.49, pp704-709 (2008)

48. K. Yoshitomi, Y. Nakama, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Nb-B Ternary System", ISIJ International, 48, pp835-844 (2008)

49. R. Ducher, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase equilibria and stability of B2 and L21 ordered phases in the Co-Fe-Ga Heusler alloy system", J. of Alloys and Compounds, 437, pp93-101 (2007)

50. X. J. Liu, C. P. Wang, F. Gao, I. Ohnuma and K. Ishida, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Sn-Ag-Cu-Ni-Au System", J. of Electronic Materials, Vol. 36, No. 11, pp1429 -1441 (2007)

51. C. P. Wang, J. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic assessment of the Co-La and Mo-La systems", J. of Alloys and Compounds, (2007)

52. C. P. Wang, P. Yu, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic assessment of the Co-Th and Fe-Th systems", J. of Alloys and Compounds, (2007)

53. C. P. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic assessments of the Cu-Mn-X (X: Fe, Co) systems", J. of Alloys and Compounds 438, pp129-141 (2007)

54. C. P. Wang, Y. F. Li, X. J. Liu and K. Ishida, "Thermodynamic assessments of the Cu-Th and Mo-Th systems", J. of Alloys and Compounds, pp208-213 (2007)

55. C. P. Wang, X. Chen, X. J. Liu, F. S. Pan and K. Ishida, "Thermodynamic modering of the Ce-Zn and Pr-Zn systems", J. of Alloys and Compounds, pp166-173 (2007)

56. X. J. Liu, F. Gao, C. P. Wang and K. Ishida, "Thermodynamic Assessmente of the Ag-Ni Binary and Ag-Cu-Ni Ternary Systems", J. of Electronic Materials, pp210-217 (2007)

57. Z. Moser, W. Gasior, K. Bukat, J. Pstrus, R. Kisiel, J. Sitek, K. Ishida and I. Ohnuma, "Pb-Free Soldiers: Part III. Wettability Testing of Sn-Ag-Cu-Bi Alloys with Sb Additions", J. of Phase Equilibria and Diffusion Vol. 28 No. 5, pp433-438 (2007)

58. T. Omori, N. Koeda, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Superplasticity of Cu-Al-Mn-Ni Shape Memory Alloy", Materials Transactions, Vol.48, No.11, pp2914-2918 (2007)

59. H. Morito, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Ishida and R. Kainuma, "Control of Phase TransformationTemperatures by Substitutes in Ni-Fe-Ga Ferromagnetic Shape Memory Alloys", Materials Transactions, Vol. 48, No. 11, pp2847-2850 (2007)

60. Y. Yamada, Y. Takaku, Y. Yagi, I Nakagawa, T. Atsumi, M. Shirai, I. Ohnuma and K. Ishida, "Reliability of wire-bonding and solder joint for high temperature operation of power semiconductor device", Microelectronics Reliability, 47, pp2147-2151 (2007)

61. C.P. Wang, X.J.Liu, R.P.Shi, C.Shen, Y. Wang, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Design and formation mechanism of self-organized core/shell structure composite powder in immiscible liquid system", Appl. Phys. Lett., 91, pp141904-1-3 (2007)

62. J.J. Wang, B.L. Wu, Z.W. Huang, T. Cui, Y.D. Wang, R. Kainuma and K. Ishida, "Stress-Induced Lattice Transit Behavior in a Cold-R0lled Cu-Al-Mn Two-Way Shape Memory Alloy", Material Science Forum, Vols. 561-565, pp1445-1449 (2007)

63. H. Ishikawa, Y. Sutou, T. Omori, K. Oikawa, A. Yoshikawa, R. Y. Umetsu, R. Kainuma and K. Ishida, "Pd-In-Fe shape memory alloy", Appl. Phys. Lett., 90, pp261906-1-3 (2007)

64. W. Ito, Y. Imano, R. Kainuma, Y. Sutou, K. Oikawa and K. Ishida, "Martensitic and Magnetic Transformation Behaviors in Heusler-Type NiMnIn and NiCoMnIn Metamagnetic Shape Memory Alloys", Metall. Mater. Trans., A, 38A, pp759-766 (2007)

65. K. Oikawa, T. Omori, Y. Sutou, H. Morito, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and Phase Transition on the Ni-Fe-Ga Ferromagnetic Shape Memory Alloy System", Metall. Mater. Trans., A, 38A, pp767-776 (2007)

66. R. Kainuma and K. Ishida, "Reactive Diffusion between Solid Fe and Liquid Zn at 723K", ISIJ International, 47, No.5, pp740-744 (2007)

67. K. Koyama, T. Igarashi, H. Okada, K. Watanabe, T. Kanomata, R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa and K. Ishida, "Magnetic and thermoelectric properties of Ni_{50}-$Mn_{36}Sn_{14}$ in high-magnetic fields", J. of Magnetism & Magnetic Materials, 310, pp e994-e995 (2007)

68. T. Yasuda, T. Kanomata, T. Saito, H. Yosida, H. Nishihara, R. Kainuma, K. Oikawa, K. Ishida, K.-U.Neumann and K. R. A. Ziebeck, "Pressure effect on transformation temperatures of ferromagnetic shape memory alloy Ni_{50}-$Mn_{36}Sn_{14}$", J. of Magnetism & Magnetic Materials, 310, pp2770-2772 (2007)

69. P. J. Brown, A. P. Gandy, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, M. Matsumoto, H. Morito, K.-U. Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck, "Magnetic shape memory behaviour", J. of Magnetism & Magnetic Materials 310, pp2755-2760 (2007)

70. H. Morito, A. Fujita, K. Oikawa and K. Ishida, "Stress-assisted magnetic-field-induced strain in Ni-Fe-Ga-Co ferromagnetic shape memory alloys", Applied Physics Letters, 90, pp062505 -1-062505-3 (2007)

71. T. Sakon, S. Yamazaki, Y. Kodama, M. Motokawa, T. Kanomata, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Magnetic Field-Induced Strain of Ni-Co-Mn-In Alloy in Pulsed Magnetic Field", Jpn. J. Appl. Phys., Vol.46, No.3 A, pp995-998 (2007)

72. R. Ducher, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase equilibria in the Ni-rich portion of the Ni-Ga binary system", Intermetallics, 15, pp148-153 (2007)

73. K. Kobayashi, K. Ishikawa, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, K. Aoki and K. Ishida, "Phase Stability

of B2 and $L2_1$ ordered phases in Co_2YGa (Y=Ti, V, Cr, Mn, Fe) alloys", J. of Mag. Mag. Materials, 310, pp1794-1795 (2007)

74. S. Farjami, T. Koyama, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase-field simulation of dragging of liquid Bi particles during the thermally activated migration of grain boundaries in the Al-Bi system",Scripta Materialia, 56, pp433-436 (2007)

75. Y.-W. Cui, T. Koyama, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Simulation of hexagonal-orthorhombic phase transformation in polycrystals", Acta. Materialia, 55, pp233-241 (2007)

76. H. Chinen, J. Sato, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "New ternary compound Co_3(Ge, W) with $L1_2$ structure", Scripta Materialia, 56, pp141-143 (2007)

77. K. Terada, I. Watanabe, "Computational aspects of tangent moduli tensors in rate-independent crystal elastoplasticity", Computational Mechanics, 40, pp497-511 (2007)

78. I. Watanabe, K. Terada, E. A. de Souza Neto, D.e Peric, "Characterization of macroscopic tensile strength of polycrystalline metals with two-scale finite element analysis", Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 56, 3, pp1105-1125 (2007)

79. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of γ"($D0_{22}$) Precipitation in Ni Base Superalloys", Materials Science Forum, Vol.561-565, pp2287-2292 (2007)

80. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-field Modeling of the Microstructure Evolutions in Fe-Cu base Alloys", Materials Science Forum, Vol.539-543, pp2383-2388 (2007)

81. T. Abe, M. Shimono, M. Ode, H. Onodera, "Estimation of the glass forming ability of the Ni－Zr and the Cu－Zr alloys", J. of alloys and compounds, Vol.434-435, pp152-155 (2007)

82. Y. Mitarai, T. Aoyagi, K. Nishida, H. Aoki, T. Abe, H. Murakami, "Phase equilibria between the B2, L12, and fcc phases in the Ir-Ni-Al system", Intermetallics, Vol.15, pp479-488 (2007)

83. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Three-Dimensional Phase Field Simulation of the Effect of Anisotropy in Grain-Boundary Mobility on Growth Kinetics and Morphology of Grain Structure", Computational Materials Science, Vol.40, pp40-50 (2007)

84. Y. Suwa, Y, Saito and H. Onodera, "Phase field simulation of stored energy driven interface migration at the recrystallization front", Materials Science and Engineering A, Vol.457, pp132 -138 (2007)

85. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Phase-Field Modeling of Recrystallization - Effects of Second-Phase Particles on the Recrystallization kinetics", Material Science Forum, Vol.558-559, pp1189-1194 (2007)

86. Y. Suwa and Y. Saito, "Effect of Mo on Phase Separation in Fe-40 at% Cr Alloys Based on Numerical Solutions of the Cahn Hilliard Equation", Materials Transactions, Vol.48, pp1891 -1895 (2007)

87. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of Abnormal Grain Growth due to Inverse Pinning", Acta Materialia, Vol.55, pp6881-6894 (2007)

88. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Assessment of the Al-Cr System by Combining the First Principles and CALPHAD Methods", Materials Science Forum, 539-543, pp 2407-2412 (2007)

89. H. Ohtani, N. Hanaya and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of Steels by Incorporating

First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", Materials Science Forum, 539-543, pp 2413-2418 (2007)

90. T. Tokunaga, S. Matsumoto, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Nb-Ni-Ti-Zr Quaternary System", Materials Transactions, 48, pp89-96 (2007)
91. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Evaluation of the Glass-Forming Ability of Nb-Ni-Ti-Zr Quaternary Alloys Using the CALPHAD Approach", Materials Transactions, 48, pp1635-1638 (2007)
92. T. Tokunaga, S. Matsumoto, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Phase Equilibria in the Nb-Ni-Zr System", Materials Transactions, 48, pp2263-2271 (2007)
93. T. Tokunaga, N. Hanaya, H. Ohtani and M. Hasebe , "Thermodynamic Analysis of the Fe-Mn-P Ternary Phase Diagram by Combining the First-Principles and CALPHAD Methods", Materials Science Forum, 561-565, pp1899-1902 (2007)
94. S. Ukita, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Ti-Zr-H Ternary Phase Diagram", Advanced Materials Research, 26-28, pp989-992 (2007)
95. T. Abe, M. Shimono, M. Ode and H. Onodera, "Estimation of the glass forming ability of the Ni-Zr and the Cu-Zr alloys", J. of Alloys and Compounds, Vol.434-435, pp152-155 (2007)
96. K. Tanaka, M. Hara, Y. Yogo, K. Nakanishi and C. Capdevila, "Phase transformation modeling of medium-carbon forging steel", Materials Science Forum, Vol. 539-543, pp2443-2448 (2007)
97. Y. Sutou, T. Omori, N. Koeda, R. Kainuma and K. Ishida: "Effects of Grain Size and Texture on Damping Properties of Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys" Materials Science & Engineering, A A438-440, pp743-746 (2006)
98. Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe and K. Ishida, "Development of Bi-Base High-Temperature Pb-Free Solders with Second-Phase Dispersion: Thermodynamic Calculation, Microstructure, and Interfacial Reaction", J. Electron Mater., 35, pp1926-1932 (2006)
99. Y. Murakami, D. Shindo, K. Kobayashi, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "TEM studies of crystallographic and magnetic microstructures in Ni-based ferromagnetic shape memory alloys", Materials Science and Engineering A 438-440, pp1050-1053 (2006)
100. Y. Tanaka, K. Oikawa, Y. Sutou, T. Omori, R. Kinuma and K. Ishida, "Martensitic transition and superelasticity of Co-Ni-Al ferromagnetic shape memory alloys with $\beta+\gamma$ two-phase structure", Materials Science and Engineering, A 438-440, pp1054-1060 (2006)
101. T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Shape memory and magnetic properties of Co-Al ferromagnetic shape memory alloys", Materials Science and Engineering, A 438-440, pp1045-1049 (2006)
102. Y. Tanaka, Y. Himuro, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic transformation and shape memory effect in ausaged Fe-Ni-Si-Co alloys", Materials Science and Engineering, A 438-440, pp1030-1035 (2006)
103. Y. Imano, T. Omori, K. Oikawa, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic and magnetic transformations of Ni-Ga-Fe-Co ferromagnetic shape memory alloys", Materials Science and Engineering, A 438-440, pp970-973 (2006)
104. R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, H. Morito, Y. Sutou, K. Oikawa, A. Fujita and K. Ishida,

"Metamagnetic shape memory effect in a Heusler-type $Ni_{43}Co_7Mn_{39}Sn_{11}$ polycrystalline alloy", Applied Physics Letters, 88, pp192513-1-3 (2006)

105. Y. Sutou, K. Yamauchi, M. Suzuki, A. Furukawa, T. Omori, T. Takagi, R. Kainuma, M. Nishida and K. Ishida, "High maneuverability guidewire with functionally graded properties using new superelestic alloys", Minimally Invasive Therapy, 15, pp204-208 (2006)

106. T. Takagi, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Yamauchi and K. Ishida, "Effect of Pre-strain on martensitic trancsformation in a $Ti_{47.6}Ni_{46.4}Nb_{6.0}$superelastic alloy and its application to medical stents", J. Biomedical Materials Research part B, 76, pp179-183 (2006)

107. K. Ando, T. Omori, J. Sato, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Effect of Alloying Elementc on fcc/hcp Martensitic Transformation and Shape Mamory Properties in Co-Al Alloys", Material Transactions, Vol.47, No.9, pp2381-2386 (2006)

108. T. Omori, W. Ito, K. Ando, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "FCC/HCP Martensitic Transformation and High-Temperature Shape Memory Properties in Co-Si Alloys", Material Transactions, Vol.47, No.9, p2377-2380 (2006)

109. K. Oikawa, Y. Tanaka, Y. Sutoh, T. Omori, F. Luo, R. Kainuma and K. Ishida, "Effects of Aging and co Addition on Martensitic and Magnetic Transitions in Ni-Al-Fe β-based Shape Memory Aloys", ISIJ International , Vol.46, No9, pp1287-1291 (2006)

110. Y. Yamada, Y. Takaku, Y. Yagi, Y. Nishibe, I. Ohnuma, Y. Sutoh, R. Kainuma and K. Ishida, "Pb-freeHigh Temperture Solders for Power Device Packaging", Microelectronics Reliability, 46, pp1932-1937 (2006)

111. Y. Murakami, T. Yano, D. Shindo, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida, "Magnetic domain structure in a metamagnetic shape memory alloy $Ni_{45}Co_5Mn_{36.7}In_{13.3}$", Scripta Materialia 55, pp683-686 (2006)

112. Y. W. Cui, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Study of Diffusion Mobility of Al-Zn Solid Solution", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, No.4, pp333-342 (2006)

113. I. Ohnuma, K. Ishida, Z. Mozer, W. Gąsior, K. Bukat, J. Pstrus, R. Kisiel and J. Sitek, "Pb-Free Solders : Part II, Application of ADAMIS Database in Modeling of Sn-Ag-Cu Alloys with Bi Additions", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp245-254 (2006)

114. J. Sato, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida "Cobalt-Base High Temperature Alloys", Science, 312, pp90-91 (2006)

115. K. Oikawa, W. Ito, Y. Imano, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida "Effect of mangnetic field on martensitic transition on $Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$ Heusler alloy", Appl. Phys. Letters, 88, pp132507-1-132507-3 (2006)

116. R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, Y. Sutou, H. Morito, S. Okamoto, O. Kitakami, K. Oikawa, A. Fujita, T. Kanomata and K. Ishida "Magnetic-field-induced shape recovery by reverse phase transformation", Nature, 439, pp957-960 (2006)

117. P. J. Brown, A. P. Gandy, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, K-U.Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck "The magnetic and structural properties of the magnetic shape memory compound $Ni_2Mn_{1.44}Sn_{0.56}$", J. Phys. Condens. Matter, 18, pp2249-2259 (2006)

118. I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida "Carbide Dispersion Carburizing (CDC) of Fe-Mo-V Based High-speed Steels", ISIJ International, 46, pp310-315 (2006)

119. Z. Moser, W. Gąsior, J. Pstruś, I. Ohnuma and K. Ishida, " Influence of Sb additions on Surface tension and density of Sn-Sb, Sn-Ag-Sb and Sn-ag-Cu-Sb alloys: Experiment vs. modeling", International J. Mat. Res. (Metallkd.), 97 (2006)

120. Z. Moser, W. Gąsior, K. Bukat, J. Pstruś, R. Kisiel, J. Sitek, K. Ishida and I. Ohuma, "Pb-Free Solders: Part 1. Wettability Testing of Sn-Ag-Cu Alloys with Bi Additions", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp133-139 (2006)

121. K. Oikawa, T. Ota, Y. Imano, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and Phase Transformation of Co-Ni-Ga Ferromagnetic Shape Memory Alloy System", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp75-82 (2006)

122. R. Umino, X. J. Liu, Y. Sutou, C. P. Wang, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Experimental Determination and Thermodynmaic Calculation of Phase Equilibria in the Fe-Mn-Al System", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp54-62 (2006)

123. K. Kobayashi, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Separation and Stability of $L2_1$-Type Phase in $Co_2(Cr_{1-x}Fe_x)$ $(Ga_{1-y}Al_y)$ Alloys", Materials Transactions, 47, No.1, pp20-24 (2006)

124. K. Oikawa, T. Ota, Y. Imano, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and Phase Transformation of Co-Ni-Ga Ferromagnetic Shape Memory Alloy System", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp75-82 (2006)

125. P. J. Brown, A. P. Gandy, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, K-U. Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck "The magnetic and structural properties of the magnetic shape memory compound $Ni_2Mn_{1.44}Sn_{0.56}$", J. Phys. Condens. Matter, 18, pp2249-2259 (2006)

126. I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida "Carbide Dispersion Carburizing (CDC) of Fe-Mo-V Based High-speed Steels", ISIJ International, 46, pp310-315 (2006)

127. T .Koyama, K. Hashimoto and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of Phase Transformation in Fe-Cu-Mn-Ni Quaternary Alloy", Materials Transactions, Vol.47, No.11, pp2765-2772 (2006)

128. K. Koyama, K. Watanabe, T. Kanomata, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida "Observation of field-induced reverse transformation in ferromagnetic shape memory alloy $Ni_{50}Mn_{36}$ Sn_{14}", Appl. Phys. Letters, 88, pp132505 -1-132505-3 (2006)

129. T. Koyama and H.Onodera, "Modeling of Microstructure Changes in Fe-Cr-Co Magnetic Alloy Using the Phase-field Method", J. Phase Equilibria and Diffusion, Vol.27, pp22 (2006)

130. T. Abe, Masato Shimono, Machiko Ode, Hidehiro Onodera: "Thermodynamic modeling of the undercooled liquid in the Cu-Zr system", Acta Materialia, Vol.54, No.2, pp909-915 (2006)

131. T. Abe, Bo Sundman, Hidehiro Onodera, "Thermodynamic assessment of the Cu-Pt system", J Phase Equilibria & Diffusion, Vol.27, No.1, pp5-13 (2006)

132. T. Abe, M.Shimono, K.Hashimoto, K.Hono and H.Onodera, "Phase separation and glass-forming abilities of ternary alloys", Scripta Materialia, Vol.55, 5, pp421-424 (2006)

133. Y. Suwa, Y.Saito and H.Onodera, "Phase field simulation of grain growth in three dimensional system containing finely dispersed second-phase particles", Scripta Materialia, Vol. 55, 4, pp407-410 (2006)

134. T. Koyama and H.Onodera, "Phase-field modeling of structural elongation and alignment of ($\alpha+\gamma$) microstructure in Fe-0.4C alloy during thermomagnetic treatment", ISIJ International,

Vol.46, No.9, pp1277-1282 (2006)

135. M. Ode, M. Ueshima, T. Abe, H. Murakami and H.Onodera, "Numerical prediction of fraction of eutectic phase in Sn-Ag-Cu soldering using the phase-field method", J.of Electron. Mater., Vol.36, No.11 (2006)

136. T. Tokunaga, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Zr-Be System Using Thermochemical Properties Based on Ab Initio Calculations", Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 30, No.2, pp201-208 (2006)

137. H. Ohtani, N. Hanaya, M. Hasebe, S. Teraoka, and M. Abe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Ti-P Ternary System by Incorporating First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 30, No.2, pp147-158 (2006)

138. K. Doi, S. Ono, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Study of the Phase Equilibria in the Sn-Ti-Zn Ternary System", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp63-74 (2006)

139. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Evaluation of the Phase Equilibria and Glass-Forming Ability of the Ti-Be System", J. Phase Equilibria and Diffusion, 27, pp83-91 (2006)

140. K. Tanaka, H. Kawaura, N. Matsumoto and K. Nishino, "Alloy Design of a cost-effective and castable heat-resistant iron alloys", Computational Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD), 30, No.4, 415-420 (2006)

141. H. Morito, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, R. Kainuma, K. Ishida and T. Takagi "Effect of Partical Substitution of Co on Magnetocrystalline Anisotropy and Magnetic-field-induced Strain in Ni-Fe-Ga Alloys ", J. Magnetism and Magnetic Mater, 290, pp850-853 (2005)

142. J. J. Wang, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Ishida and K. Oikawa "Two-way Shape Memory Effect induced by Cold-rolling in Ti-Ni and Ti-Ni-Fe Alloys", Scripta Materialia, 52, pp311-316 (2005)

143. Y. Sutou, T. Omori, Y. Yamauchi, N. Ono, R. Kainuma, and K. Ishida, "Effect of Grain Size and texture on Pseudoelasticity in Cu-Al-Mn-based Shape Memory Wire", Acta Materialia, 53, pp4121-4133 (2005)

144. J. Sato, K. Oikawa, R. Kainuma and K Ishida, "Experimental Verification of Magnetically Induced Phase Separation in αCo Phase and Thermodynamic Calculations of Phase Equilibria in the Co-W System. ", Materials Transactions, 46, pp1199-1207 (2005)

145. K. Kobayashi, R. Y. Umetsu, A. Fujita, K. Oikawa, R. Kainuma and K Ishida, "Magnetic Properties and Phase stability of Half-metal-type $Co_2Cr_{1-x}Fe_xGa$ Alloys.", J. of Alloys and Compounds, 399, pp60-63 (2005)

146. K. Oikawa, H. Mitsui and K Ishida, "A Thermodynamic Database for Fe-Cr-Mn-Ni-Ti-S-C-N System", Material Science Forum, Vols. 500-501, pp711-718 (2005)

147. X. J. Liu, M. Kinaka, Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma and K Ishida, "Experimental Investigation and Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Sn-Au-Ni System", J. Electr. Mater, 34, pp670-679 (2005)

148. G. W. Qin, K. Oikawa, M. Sato, O. Kitakami, Y. Shimada, K. Fukamichi and K. Ishida, "Co-Mo and Co-Mo-Cr Alloy Thin Films Promising for Magnetic Recording", IEEE Trans. Mag., 41,

pp918-920 (2005)

149. G. V. Vassilev, X. J. Liu and K. Ishida, "Experimental Studies and Thermodynamic Optimization of the Ni-Bi System ", J. Phase Equilibria and Diffusion, 26, pp161-168 (2005)

150. K. Oikawa, Y. Imano, V. A. Chernenko, F. Luo, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Influence of Co Addition on Martensitic and Magnetic Transistions in Ni-Fe-Ga Based Shape Memory Alloys", Materials Transactions, 46, pp734-737, (2005)

151. H. Shima, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi and K. Ishida, "Large Magnetocrystalline Anisotropy Energy of $L1_0$-type $Co_{100-x}Pt_x$ Bulk Single Crystral Prepared under Compressive Stress", Appl. Phys. Letters, 86 pp112515-112517 (2005)

152. C. P. Wang, X. J. Liu, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic Database of the Phase Diagrams in Copper Base Alloy Systems", J. Phys. Chem. Solids, 66, pp256-260 (2005)

153. M. Jiang, C. P. Wang, X. J. Liu, I. Ohnuma, K. Kainuma, G.P. Vassilev and K. Ishida, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Cu-Ni-Zn System", J. Phys. Chem. Solids, 66, pp246-250 (2005)

154. PJ. Brown, K. Ishida, R. Kainuma, T. Kanomata, K-U. Neumann, K. Oikawa, B. Ouladdiaf and K. R. A. Ziebeck, "Crystal Structures and Phase Transitions in Ferromangetic Shape Memory Alloys Based on Co-Ni-Al and Co-Ni-Ga", J. Phys. Condens. Matter., 17, pp1301-1310 (2005)

155. N. Koeda, Y. Sutou, T. Omori, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic Transformation of Cu-10at%Al-9at%Ga-11at%Mn Ferromagnetic β Alloy", Scripta Materialia, 52, pp1153-1156 (2005)

156. R. Kainuma, J. Sato, I. Ohnuma and K. Ishida, "Phase Stability and Interdiffusivity of the $L1_0$-based Ordered Phases in Al-rich Portion of the Ti-Al Binary System", Intermetallics, 13, pp784-791 (2005)

157. R. Kainuma, X. J. Liu, I. Ohnuma, S. M. Hao and K. Ishida, "Miscibility Gap of B2 Phase in Ni-Al to Cu_3Al Section of the Cu-Al-Ni System", Intermetallics, 13, pp665-661 (2005)

158. Y. Himuro, Y. Tanaka, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Equilibria and ’-$L1_2$ Phase Stability in the Ni-rich Portion of Ni-Fe-Si and Ni-Fe-Al Systems", Intermetallics, 13, pp620-630 (2005)

159. N. Koeda, T. Omori, Y. Stou, H. Suzuki, M. Wakita, R. Kainuma and K. Ishida, "Damping Properties of Ductile Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys", Materials Transactions, 46, pp118-122 (2005)

160. T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Shape Memory Effect in the Ferromagnetic Co-14at.% Al Alloy", Scripta Materialia, 52, pp565-569 (2005)

161. H. Morito, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, R. Kainuma, K. Ishida, "Enhancement of magnetic-field-induced strain in Ni-Fe-Ga-Co Heusler alloy", Scripta Materialia, 53, pp1237-1240 (2005)

162. R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, K. Oikawa, R. Kainuma, and K. Ishida, "Half-metallic properties of $Co_2(Cr_{1-x}Fe_x)Ga$ Heusler alloys", PHYSICAL REVIEW B, 72, pp214412 (2005)

163. H. Shima, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Ishida, S. Nakamura and T. Nojima

"Magnetocrystalline Ani sotropy Energy in $L1_0$-type Co-Pt Single Crystals", J. Magnetism and Mangetic Mater, 290, pp566-569 (2005)

164. T. Koyama, "Computer Simulation of Phase Decomposition in Magnetic Materials Based on the Phase-field Method", Defect and Diffusion Forum, Vol.237-240, pp593 (2005)

165. T. Koyama and H.Onodera, "Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cu-Mn-Ni Quaternary Alloy Using the Phase-Field Method", Materials Transactions, Vol.46, pp1187 (2005)

166. T. Abe, Shimono Masato, Machiko Ode, Hidehiro Onodera, "Thermodynamic modeling of the undercooled liquid in the Ni-Zr system", Materials Transactions, Vol.46, No.12, pp2838 (2005)

167. M. Ode, S.G. Kim, W.T. Kim and T. Suzuki, “Numerical Simulation of Peritectic Reaction in Fe-C Alloy Using a Multi-phase-field Model”, ISIJ International, 45, pp147-149 (2005)

168. H. Ohtani, S. Matsumoto, B. Sundman, T. Sakuma and M. Hasebe, "Equilibrium between fluorite and pyrochlore structures in the ZrO_2-Nd_2O_3 system", Materials Transactions, 46, pp1167-1174 (2005)

169. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic study of phase equilibria in the Ni-Fe-B system", Materials Transactions, 46, pp1193-1198 (2005)

170. M. Fukasawa, S. Tamura and M. Hasebe, "Development of thermodynamic database for U-Zr-Fe-O-B-C-FPs system", J. Nucl. Sci. Technol. 42, pp706-716 (2005)

171. S. Matsumoto, T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of the phase equilibria of the Nb-Ni-Ti system", Materials Transactions, 46, pp2920-2930 (2005)

172. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Evaluation of the glass-forming ability of Zr-Ti-Be ternary alloys using the CALPHAD-type approach", Materials Transactions, 46, pp2931-2939 (2005)

173. N. Hirata, K. Anzai, "Fluid Flow Simulation for Suface Tension Dominat Progress", Proceedings of the 9^{th} Asian Foundry Congress, pp492-498 (2005)

174. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic evaluation of the phase equilibria and glass-forming ability of the Fe-Si-B system", Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 28, pp354-362 (2004)

175. K. Doi, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic study of the phase equilibria in the Sn-Ag-Bi-Cu quaternary system", Materials Transactions, 45, pp380-383 (2004)

176. H. Ohtani, S. Ono, K. Doi, and M. Hasebe, "Thermodynamic study of phase equilibria in the Sn-Ag-Bi-Zn quaternary system", Materials Transactions, 45, pp614-624 (2004)

177. H. Ohtani, Y. Chen, and M. Hasebe, "Phase Separation of the B2 Structure Accompanied by an Ordering in Co-Al and Ni-Al Binary Systems", Materials Transactions, 45, pp1489-1498 (2004)

178. H. Ohtani, Y. Takeshita, and M. Hasebe, "Effect of the Order–Disorder Transition of the bcc Structure on the Solubility of Be in the Fe-Be Binary System", Materials Transactions, 45, pp1499-1506 (2004)

179. T. Tokunaga, K. Hashima, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Ni-Si-Ti System Using Thermochemical Properties Determined from Ab Initio Calculations", Materials Transactions, 45, No.5, pp1507-1514 (2004)

180. H. Ohtani, M. Yamano, and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Al-C Ternary System by Incorporating ab initio Energetic Calculations into the CALPHAD approach", ISIJ International, 44, No.10, pp1738-1747 (2004)

181. H. Ohtani, M. Yamano, and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Co-Al-C and Ni-Al-C Systems by Incorporating ab initio Energetic Calculations into the CALPHAD approach", Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 28, pp177-190 (2004)

182. T. Kunieda, Y. Murata, M. Morinaga, and T. Koyama, "Effect of Refractory Elements (X: Mo, W, Re) on the Microstructure Evolution of Fe-$_{8}$Cr-$_{0.1}$C-X Martensitic Steels during Tempering", Materials Transactions, 45, pp392-395 (2004)

183. T. Koyama and H. Onodera, "Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Based on the Phase-Field Method", Trans. MRS-J, 29, pp3775-3778 (2004)

184. K. Oikawa, G. W. Qin, M. Sato,S. Okamoto, O. Kitakami, Y. Shimada, K. Fukamichi, K. Ishida, and T. Koyama, "Direct Observation of Magnetically Induced Phase Separation in Co-W Sputtered Thin Films", Applied Phys. Lett., 85, pp2559-2561 (2004)

185. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Under External Magnetic Field", Metals and Materials International, 10, pp321-326 (2004)

186. X.Y. Xiong, T. Ohkubo, T. Koyama, K. Ohashi, Y. Tawara, and K. Hono: "The microstructure of sintered $Sm(Co_{0.72}Fe_{0.20}Cu_{0.055}Zr_{0.025})_{7.5}$ permanent magnet studied by atom probe", Acta Materialia, 52, pp737-748 (2004)

187. Y. K. Takahashi, T. Koyama, M. Ohnuma, T. Ohkubo, and K. Hono: "Size dependence of ordering in FePt nanoparticles", J. App. Phys., 95, pp2690-2696 (2004)

188. S. G. Kim, W. T. Kim, T. Suzuki, M. Ode, "Phase-field modeling of eutectic solidification", J. Crytal Growth, 261, pp135-158 (2004)

189. T. Koyama and H. Onodera, " Modeling of Microstructure Changes in FePt Nano-Granular Thin FilmsUsing the Phase-Field Method ", Materials Transactions, 44, pp1523-1528 (2003)

190. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-Field Simulation of Microstructure Changes in Ni2MnGa Ferromagnetic Alloy Under External Stress and Magnetic Fields", Materials Transactions, 44, pp2503-2508 (2003)

191. M. Ode, T. Koyama, H. Onodera, and T. Suzuki, "Phase-Field Modeling for Sn-Bi Soldering", J. Electronic Materials, 32, No.12, pp1534-1539 (2003)

192. X. J. Liu, I. Ohnuma, C. P. Wang, M. Jiang, R. Kainuma, K. Ishida, M. Ode, T. Koyama, H. Onodera, and T. Suzuki, "Thermodynamic Database on Microsolders and Copper-Based Alloy Systems, J. Electronic Materials, 32, No.11, pp1265-1272 (2003)

（その他原著論文）

（国内）

1. 小山敏幸，"Phase-field 法に基づく磁性材料の組織形成シミュレーションと特性解析", まぐね, 3, pp.564-571, (2008)

2. 阿部太一，橋本清，"Thermo-Calc による状態図･熱力学計算4"，金属，Vol.77，pp429-435

(2007)

3. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算5", 金属, Vol.77, pp532-538 (2007)
4. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算6", 金属, Vol.77, pp656-663 (2007)
5. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算7", 金属, Vol.77, pp776-781 (2007)
6. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算8", 金属, Vol.77, pp898-904 (2007)
7. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算9", 金属, Vol.77, pp1011-1017 (2007)
8. 阿部太一, 橋本清, "Thermo-Calc による状態図・熱力学計算10", 金属, Vol.77, pp 1148-1153 (2007)

（国際）

1. T. Koyama, "Phase-field modeling of microstructure evolutions in magnetic materials", Science and Technology of Advanced Materials, 9, 013006 (2008)

（2） 学会発表（国際学会発表及び主要な国内学会発表）

① 招待講演（*基調講演） （国内会議 29件、国際会議 54件）

① 招待講演（*基調講演） 国内会議

1. 高久佳和, "パワー半導体デバイス用高温はんだ接合と信頼性", 溶接学会・第 46 回ソルダリング分科会, 東京, 2008 年 10 月 24 日
2. 小山敏幸, "Phase-field 法を用いた格子不整合領域が関与する組織形成の解析", 日本機械学会 2008 年度年次大会, 横浜国立大学, 横浜, 2008 年 8 月 3 日~7 日
3. 小山敏幸, "強誘電体ドメイン組織形成に対する Phase-field シミュレーションと誘電特性解析", 第 13 回計算工学研究会, 仙台市民会館, 仙台, 2008 年 5 月 19 日~21 日
4. 小山敏幸,"鉄合金における Phase-field 組織形成シミュレーション", 日本鉄鋼協会 2008 年第 155 回春季講演大会, 武蔵工業大学世田谷キャンパス, 東京, 2008 年 3 月 26 日~28 日
5. 大谷博司, "第一原理計算による鉄鋼材料の熱力学的物性の評価", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日
6. 片桐昌彦, "計算科学とアニメーションで描く水素と材料の世界", FC EXPO 2008, 第 4 回国際水素・燃料電池展 専門技術セミナー, 東京ビッグサイト西展示棟, 東京, 2008 年 2 月 27 日~29 日
7. *石田清仁, "Co 基合金における金属間化合物－相安定性と耐熱合金への展開－", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日
8. 小山敏幸, "固体メゾスケール組織形成の Phase-field シミュレーション", 日本機械学会 2007 年

度年次大会 先端技術フォーラム, 関西大学千里山キャンパス, 大阪, 2007 年 9 月 9 日~12 日

9. 諏訪嘉宏, 小山敏幸, 小野寺秀博, 齊藤良行, "発表題目 統一的サブグレイン成長モデルに基づく再結晶シミュレーションと得られた組織の解析手法について", 日本機械学会 A-TS 研究会, 東京 2007 年 6 月 30 日

10. *貝沼亮介, 須藤祐司, 大森俊洋, 山内清, 石田清仁, "高性能 Cu-Al-Mn 形状記憶合金の材料特性",先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

11. 小山敏幸, "Phase-field 法に基づく材料組織・特性計算の現状と今後" 第 12 回 日本計算工学会講演会, 立青少年オリンピック記念センター, 東京, 2007 年 5 月 22 日~24 日

12. *貝沼亮介, "NiMnIn 基ホイスラー合金のマルテンサイト変態とメタ磁性相転移", 日本物理学会 2007 年春季大会, 鹿児島大学郡元キャンパス, 2007 年 3 月 18 日~21 日

13. 高久佳和, "パワー半導体デバイス実装用高温鉛フリーはんだの接合性と信頼性", 社団法人エレクトロニクス実装学会・エレクトロニクス実装学会信頼性解析技術委員会シンポジウム, 東京, 2007 年 3 月 6 日

14. 諏訪嘉宏, 齊藤良行, 小野寺秀博, "多結晶材料の再結晶における組織形成シミュレーション", 日本機械学会年次大会, 熊本大学, 2006 年 9 月 21 日

15. *貝沼亮介, 及川勝成, 石田清仁, "多元系金属間化合物に関する最近の話題",日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

16. 小池淳一, "Cu/ILD 界面バリア層の材料科学", 日本応用物理学会, 武蔵工業大学, 2006 年 8 月

17. 小池淳一, 羽根田雅希, 飯島純, 和田真, "Cu 合金配線を用いた 45nm 世代のバリア層自己形成プロセス", 半導体・集積回路技術第 70 回シンポジウム, 機械振興会館ホール, 東京, 2006 年 7 月

18. 小池淳一, "Mg 合金の変形と破壊の微視的機構", 第 17 回高性能 Mg 合金創成加工研究会, 熊本大学, 2006 年 7 月

19. 小池淳一, "多層配線におけるバリア層の新展開", Semi Forum Japan 2006, 多層配線技術セミナー、グランキューブ大阪, 2006 年 6 月

20. 大谷博司, "第一原理に基づく合金の熱力学的物性評価とその材料設計への応用", 平成 18 年度合同学術講演大会シンポジウム「材料工学におけるシミュレーション」 北九州,(日本金属学会九州支部, 日本鉄鋼協会九州支部共催)2006 年 6 月

21. 小池淳一, "マグネシウム合金の変形・破壊機構と加工プロセスへの指針", 軽量材料セミナー, 物質・材料研究機構, つくば, 2006 年 5 月

22. 小山敏幸, " Phase-field 法を用いた相変態・組織形成の解析",日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

23. 及川勝成, "凝固中に生成する鋼中硫化物の形態制御", 第 119 回日本鉄鋼協会特殊鋼部会, 加古川, 2005 年 11 月

24. 小山敏幸, "Fe-Cu 系合金の組織形態形成に対する Phase-Field モデリング", 第 18 回計算力学講演会, 日本機械学会, つくば, 2005 年 11 月 19 日~21 日

25. 小池淳一, "Mg 合金の変形機構と加工性―粒径と配向性の影響", 日本学術振興会, 加工プロセスによる材料新機能発現第 176 委員会, 名古屋大学, 2005 年 10 月

26. 貝沼亮介, 及川勝成, "石田清仁 Ni 基磁性形状記憶材料の合金設計", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回) 講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

27. 小山敏幸, "金属間化合物組織に対する Phase-field モデリング", 日本金属学会 2005 年秋期 (第 138 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

28. 小野寺秀博, "計算材料科学の現状と展望", 河上・赤見記念講演, 第 60 回日本熱処理技術協会講演大会, 日本熱処理技術協会, 2005 年 5 月 30 日~31 日

29. 小池淳一, 宮村剛夫, "マグネシウム合金板材の配向性と変形機構", 金属学会セミナー, マグネシウム合金の製造と加工技術の最先端, 横浜国立大学, 2005 年 3 月

① 招待講演(*基調講演) 国際会議

1. I. Ohnuma, C. P. Wang, X. J. Liu and K. Ishida (Invited), "Development of Thermodynamic Database for Cu-base Alloy Systems and Micro-Solders", 2009 TMS annual meeting, San Francisco, USA, Feb.15~19, 2009

2. Kenjiro Terada and Ikumu Watanabe:“Numerical material testing for strength evaluation of polycrystalline metals”4th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM-2008) Nov. 27-31, 2008, Tallahassee, Florida, USA

3. Y. Suwa, H. Onodera, "Three-dimensional phase-field simulation of grain growth", 4th Int. Symp. on Designing, Processing and Properties of Adv. Eng.Mater., ISAEM2008, Nagoya, Nov.18~21, 2008

4. K. Ishida, " Phase Diagrams and Design of Some Advanced Materials", The 14th National Conference and Multilateral Symposium on Phase Diagrams and Materials Design (2008NCMS), Changsha, China, Nov.3~5, 2008

5. Ikuo Ohnuma, Takuro Saegusa, Yoshikazu Takaku, Ryosuke Kainuma, Kiyohito Ishida, "Microstructural Evolution of Alloy Powder for Electronic Materials with Liquid Miscibility Gap", The 14th National Conference and Multilateral Symposium on Phase Diagrams and Materials Design (2008NCMS), Changsha, China, Nov.3~5, 2008

6. R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa and K. Ishida, "The Ni-Mn-based metamagnetic shape memory alloys", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA, June 27~July 5, 2008

7. *K. Ishida "RECENT PROGRESS ON CO-BASE ALLOYS – PHASE DIAGARMS AND APPLICATION –". TOFA2008 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), Krakow, Poland, June 22~27, 2008

8. R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa and K. Ishida, "Metamagnetic shape memory in the NiMnIn and NiMnSn based Heusler-type alloys", CIMITEC2008 (The 3rd International Conference "Smart Materials, Structures and Systems"), Acireale, Sicily, Italy, June 8~13, 2008

9. I. Ohnuma, T. Saegusa, Y. Takaku, R. Kainuma and K. Ishida, "Microstructural evolution of alloy powder for electronic materials with liquid miscibility gap", TMS 2008 Annual Meeting & Exhibition, New Orleans, USA, March 9~13, 2008

10. *K. Ishida "Phase Diagrams and Design of Some Non-Ferrous Advanced Materials", ICNFM 2007 (InternationalConference of Nonferrous Materials, 2007) Changsha China, Nov. 25~27, Zhangjiajie, China, Nov.28~30, 2007

11. T. Koyama and H.Onodera, "Phase-Field Simulation of γ"($D0_{22}$) Precipitation in Ni Base Superalloys", The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM6), Jeju Island, Korea, Nov. 5 ~9, 2007

12. *R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa and K. Ishida "Metamagnetic Shape Memory Effect in the Ni-Mn-Based Heusler-type Alloys", The 44th Annual Meeting of the Society of Engineering Science ,Texas, USA, Oct. 21-24, 2007

13. *K. Ishida "Recent Progress on Co-base Alloys - Phase Diagrams and Application-", 62nd ABM'S ANNUAL INTERNATIONAL CONGRESS, Vitória, Brazil, July 23~27, 2007

14. I. Ohnuma, Y. Takaku, K. Makino, R. Kainuma and K. Ishida, "Application of Zn-Al Base Alloys to Pb-Free High Temperature Solders", TMS Annual Meeting & Exhibition: Orlando, Florida, Feb. 25~March. 1, 2007

15. J. Koike, "Impact of Mg alloys on structural application", International Symposium on Magnesium Technology in the Global Age, Montreal, Canada, October, 2006

16. H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of Steels by Incorporating First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", THERMEC'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Invited Presentation Vancouver, Canada, July4~8, 2006.

17. H. Onodera, T. Abe and K. Hashimoto, "Modeling of HCP/D019, D019/L10, BCC/B2 Phase Equilibria in a Ti-Al System by the CVM-CALPHAD Method", THERMEC'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

18. T. Abe, M. Ode, H. Murakami, C. Kocer, C-S.Oh and H. Onodera, "The thermodynamic assessment of the Ir-based alloy systems", THERMEC'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

19. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-field Modeling of the Microstructure Evolutions in Fe-Cu Base Alloys", THERMEC'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

20. M. Ode, T. Abe and H. Onodera, "Numerical Simulation of Microstructure evolution in the interdiffusion zone between Al-binally alloy amd Ir", THERMEC'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

21. K. Tanaka, M. Hara, Y. Yogo, K. Nakanishi and C. Capdevila, "Phase Transformation Modeling of Medium-Carbon Forging Steel", THERMEC'2006(International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

22. K. Oikawa, H. Mitsui and K. Ishida, "Thermodynamic Estimation of Precipitation Behaviour of Ti4C2S2, TiS and TiC in Austenitic Steels", Thermec'2006(International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July4~8, 2006

23. T. Koyama and H. Onodera, "Phase-Field Modeling of Microstructure Evolutions in Real Materials", 13th German-Japanese Workshop on Chemical Information, The Univ. of Tokyo, Japan, June 25~26, 2006

24. *K. Ishida "Microstructural Control of Advanced Materials Based on Phase Diagram Study", TOFA2006 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), Beijing China, June 18~23,

2006

25. J. Koike, "Cu alloy metallization for self-forming barrier process", International Interconnect Technology Conference, San Francisco, USA, June, 2006
26. J. Koike, "Cu alloy metallization for self-forming barrier process", Material Research Society Symposium, San Francisco, USA, April. 2006
27. K. Ishida, "Phase diagram and design of cobalt-base alloy systems", TMS2006 135th Annual Meeting, San Antonio, Texas, USA, March 12~16, 2006
28. R. Kainuma, Y. Sutou, K. Oikawa, K. Ishida, "Martensitic and Magnetic Transformations of the Ni-Mn-Based Ferromagnetic Shape Memory Alloys", TMS2006 135th Annual Meeting, San Antonio, Texas, USA, March 12~16, 2006
29. K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "Magnetic and Marutensitic Transformation of Ni-(Co, Fe)-(Al", Ga) β Alloys", TMS2006 135th Annual Meeting, San Antonio, Texas, USA, March 12~16, 2006
30. M. Ode, M. Ueshima, T. Abe, H. Murakami and H. Onodera, "Numerical Prediction of Fraction of Eutectic Phase in Sn-Ag-Cu Soldering", TMS2006 135th Annual meeting&Exhibition, San Antonio,Texas, USA, March 12~16, 2006
31. J. Koike, "Microstructural impact on stress migration reliability", Tutorial Lecture, International Reliability Physics Symposium, San Jose, USA, March, 2006
32. K. Oikawa, K. Ishida and T. Koyama, "Simulation of Phase Separation Behaviors of Co-Cr Based Thin Film for Magnetic Recording Media", International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences, Chennai, INDIA, Dec. 2005
33. J. Koike, "Deformation mechanisms and their grain-size dependence in magnesium alloys", Workshop on fine grained materials: opportunities and challenges, Vancouver, Canada, Nov. 2005
34. J. Koike, "Self-forming barrier process with Mn addition in Cu metallization", Advanced metallization conference, Tokyo, Japan, Oct. 2005
35. J. Koike, "Self-forming barrier with Cu alloy metallization and its effects on reliability", International workshop on stress-induced phenomenoa in metallization, Dresden, Germany, Sep. 2005
36. H. Onodera and T. Koyama, "Computer Simulation of Microstructure Evolution based on the Phase-field Method", NIMS-MPI-MF workshop, Max Planck Institut, Metallforschung, July 25~27, 2005
37. K. Ishida, "Heat Treatment and Microstructural Control of Co-Ni-Al and Cu-Al-Mn Base Alloys Shape Memory", 韓国熱処理学会, Changwon, Korea, June 23~24, 2005
38. T. Koyama, "Modeling of complex microstructure changes in metallic materials using the Phase-field method", 1st NAREGI International Nanoscience Conference, Nara, Japan, June 14~17, 2005
39. K. Ishida, "Development of advanced materials based on phase diagrams and microstructural control", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys and Microstructural Control Design of Advanced Materials And Microstructural Control), Shenyang, CHINA, June 11~13, 2005

40. R. Kainuma, K. Kobayashi, I. Ohnuma, K. Ishida "Miscibility gap and stability of B2 phase in the Co-Al based ternary systems", ISPD, Shenyang, CHINA, June 11-13, 2005

41. K.Oikawa, "Magnetically induced phase separation in the fcc phase and thermodynamic calculation of phase equilibria of the Co-Cr system", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys and Microstructural Control Design of Advanced Materials And Microstructural Control), Shenyang, CHINA, June 11~13, 2005

42. J. Koike, "Quantitative Evaluation of Interface Adhesion Strength in Multilayer Films by Nanoscratch Test、Materials Research Society Spring Meeting", San Francisco, April, 2005

43. J. Koike, "Texture-related reliability problems of Cu thin films for semiconductor applications", TMS Spring Meeting, San Francisco, USA, March, 2005

44. K. Ishida, "Development of Thermodynamic Database on Micro-Solders and Cu Base Systems ", The 5th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, Beijing, China, Nov. 2~5. 2004

45. H. Ohtani and M. Hasebe, "Construction of Phase Diagrams Incorporating ab initio Calculations into CALPHAD Approach", 3rd Japan-China Symposium on Materials and Molecular Design, Invited Presentation, Tokyo, (日本学術振興会他), October, 2004

46. I. Ohnuma, N. Kamiya, R. Kainuma, K. Ishida, "Thermodynamic Assessment of the Interaction Between the Chemical and Magnetic Ordering in the Fe-X(X=Al, Co, Ga, Ni, Si) Binary ", Materials Solutions Conference and Exposition 2004, The User Aspects of Phase Diagram, Columbus, USA, Oct. 18~20, 2004

47. J. Koike, "Texture-related grain-size dependence on deformation mechanisms in Mg alloys", Int. Conf. on Magnesium Science, Technology and Applications, Beijing China, September, 2004

48. J. Koike, "Interface Adhesion and Phase Formation in Cu Interconnect", Solid State Devices and Materials, Tokyo, Japan, September, 2004

49. T. Koyama, "Computer Simulation of Phase Decomposition in Magnetic Materials Based on the Phase-field Method", Sixth International Conference on Diffusion in Materials held at AGH University of Science and Technology in Krakow, Poland, July 18~23, 2004.

50. K. Ishida "Development of Advanced Materials Based on Phase Diagrams and Microstructural Control", CALPHAD XXXIII, Klakow, Poland, May 25-30, 2004

51. *I. Ohnuma "Experimental Investigation and Thermodynamic Assessment of the Intereaction between the Chemical and magnetic Ordering of the Fe-Al and Fe-ga Systems", CALPHAD XXXIII, Klakow, Poland, May 25~30, 2004

52. J. Koike, "Reliability of Cu/barrier structure in nanometer interconnect lines", 2004 TMS Spring Meeting, Charlotte, USA, March, 2004

53. J. Koike, "Plastic Anisotropy and its effects on mechanical parameters in Mg alloys at RT", 2004 TMS Spring Meeting, Charlotte, USA, March, 2004

54. K. Ishida, "Phase Diagrams as a Tool for Advanced Materials Design-Application to Non-ferrous Alloys", International Symposium on Phase Diagrams as a Tool for Advanced Materials Design, Sapporo, Feb. 24~25, 2004

② 口頭発表 （国内会議）(国内会議 229件、国際会議 141件）

② 口頭発表 （国内会議）

1. 貝沼亮介, "優れた特徴を有する新規形状記憶合金の開発", 日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
2. 及川勝成, "熱力学データベースの構築と計算状態図の材料設計への応用", 日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
3. 大沼郁雄,王翠萍,劉興軍,石田清仁, "銅基合金の熱力学データベースの開発とその応用",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
4. 大森俊洋, 佐藤順, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al-W 基合金における添加元素の分配挙動と相変態温度に及ぼす影響",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会, 東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
5. 宮本隆史, 長迫実, 貝沼亮介, 石田清仁, "コンビナトリアル法を用いた Ni-Mn-Sb 3 元系等温状態図の実験的決定", 日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
6. 大久保亮成, 梅津理恵, 小林恒誠, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co2Mn(Ga1-*x*Z*x*) (Z=Ge, Sn) ホイスラー合金の相安定性と磁気的性質",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
7. 知念響, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-(W or Mo)-Ta3元系における L12 化合物の相安定性と組織変化",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
8. 伊東航, 長迫実, 梅津理恵, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁, "NiCoMnIn 合金のマルテンサイト変態挙動と磁気特性に及ぼす母相規則度の影響",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
9. 田中優樹, 須藤祐司, 大森俊洋, 石田清仁, 貝沼亮介, "Fe-Ni-Co-Al-X 合金における γ/α'マルテンサイト変態と形状記憶特性",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
10. 高久佳和, 大森俊洋, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "常温の水で水素発生する Al 合金の開発",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
11. 長迫実, 伊東航, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni50Mn50-XSnX 合金におけるマルテンサイト相のマイクロツイン組織と長周期構造",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
12. 梅津理恵, 小林恒誠, 貝沼亮介, 山口泰男、大山研 3、石田清仁, "Co2*Y*Ga (*Y* = Ti, V, Cr, Mn, Fe) ホイスラー合金の中性子粉末回折測定による規則度の決定",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
13. 大塚誠, 梅津理恵, 貝沼亮介, 石田清仁, " Ni-Mn-In メタ磁性形状記憶合金スパッタ膜の磁気特性",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日
14. 塚本裕貴, 小林覚, 高杉隆幸, 石田清仁, "拡散対/析出熱処理を利用した Co-Al-W3元系状態図の決定",日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）講演大会,東京工業大学, 2009 年 3 月 28 日~30 日

15. 諏訪嘉弘, 小野寺秀博, "二相混合組織における粒成長の三次元 Phase-field シミュレーション", 第 21 回計算力学講演会, 日本機械学会, 琉球大学, 2008 年 11 月 1 日~3 日

16. 諏訪嘉弘, 小野寺秀博, "Phase-field 法の再結晶・粒成長・γ→α 変態への適用例", 日本金属学界第五回ヤングメタラジスト研究交流会, ＪＦＥスチール株式会社, 川崎市, 2008 年 10 月 23 日

17. K. Oikawa, H. Mitsui, T. Sasaki and K. Ishida, "Phase equilibria of Fe-Nb-S and FeV-S ternary systems", 日本鉄鋼協会 第 156 回秋季講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

18. 長迫実, 伊東航, 貝沼亮介, 石田清仁, "投下型電子顕微鏡法による $Ni_{50}Mn_{50}$-XSnX 合金における長周期マルテンサイト相の評価", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

19. 梅津理恵, 伊東航, 伊藤恒平, 小山佳一, 藤田麻哉, 及川勝成, 鹿又武, 貝沼亮介, 石田清仁, "$Ni_{50}Mn_{34}In_{16}$ 合金の強磁場中磁化測定", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

20. 伊藤恒平, 伊東航, 梅津理恵, 田島伸, 川浦宏之, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Co-Mn-Sn 放電プラズマ焼結材におけるメタ磁性形状記憶効果",日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

21. 柴入紘介, 知念響, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al-Ta 合金における相平衡ならびに $L1_2$ 化合物相の安定性", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

22. F. Gao, C. P. Wang, X. J. Liu, Y. Takaku, I. Ohnuma, and K. Ishida, "Experimental Investigation and Thermodynamic Assessment of the Sn-Ag-Au System", 日本金属学会 2008 年第 143 回秋期大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

23. 渡邉慧太, 高久佳和, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Zn-Al 鉛フリー高温はんだと Ni 基板との界面反応", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス,2008 年 9 月 23 日~25 日

24. 宮本隆史, 伊東航, 長迫実, 貝沼亮介, 石田清仁, "コンビナトリアル法を用いた Ni-Mn-In 3 元系等温状態図の実験的決定", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

25. 大久保亮成, 梅津理恵, 小林恒誠, 長迫実, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 石田清仁, "$Co_2Mn(Ga_{1-x}Si_x)$ ホイスラー合金の相安定性と磁気的性質", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

26. 品川一矢, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Ni-Al-W 合金への Cr 添加による γ'相への影響", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

27. 石川博康, 須藤祐司, 大森俊洋, 梅津理恵, 貝沼亮介, 石田清仁, "d-In-Fe 合金のマルテンサイト変態と磁気特性", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

28. 知念響, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-W-Ga3元系の $L1_2$ 化合物の相安定性とCo 側における相平衡", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

29. 櫻田優樹, 須藤祐司, 高木隆光, 伊東航, 貝沼亮介, 石田清仁, "Au-Cu-Al 系合金の形状記憶特性及び耐食性評価", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

30. 安藤佳祐, 大森俊洋, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al 合金の高温形状記憶特性に及ぼす Si 添加の影響", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

31. 高久佳和, 三枝拓朗, 大森俊洋, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "偏晶型 Ag 基合金粉末の相平衡と焼結体の電気抵抗特性“, 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日~25 日

32. 大森俊洋, 須藤祐司, 肥田直樹, 貝沼亮介, 石田清仁, "Cu-Al-Mn 基形状記憶合金の超塑性", 日本機械学会 横浜国大, 2008 年 8 月 4 日~7 日

33. 石川博康, 須藤祐司, 大森俊洋, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "Pd-In 系形状記憶合金の開発", 日本機械学会 横浜国大, 2008 年 8 月 4 日~7 日

34. 寺田賢二郎, "レベルセット関数を用いた非均質ミクロ構造のソリッドモデリング手法とそのマルチスケール解析への適用", 第 13 回計算工学講演会, 仙台, 2008 年 5 月 21 日

35. 阿部太一, Cenk Kocer, 小野寺秀博, "第一原理計算による高 Cr 鋼中の Z 相の安定性解析", 日本熱処理技術協会春季講演大会, 東京工業大学, 2008 年 5 月 9 日~30 日

36. 阿部太一, 橋本清, Cenk Kocer, 御手洗容子, 小野寺秀博, "PANDATとThermo-Calcオプティマイザー比較（Ir-Pt 二元系状態図を例に）", 学振合金状態図第172委員会, 日本原子力研究機構, 東海, 2008 年 5 月 16 日

37. 大森俊洋, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "マルテンサイトを利用した Cu-Al-Mn 基制振合金の基礎特性", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

38. 知念響, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-W-Ga 合金における L12 化合物相の析出", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

39. 品川一矢, 大森俊洋, 佐藤順, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Ni-Al-W 合金の Ni 量と組織 機械的特性の関係", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

40. 伊東航, 長迫実, 梅津理恵, 伊藤恒平, 宮本隆史, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁, "$Ni_{50}Mn_{(50-x)}Snx$ 磁性形状記憶合金の結晶構造と相安定性", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

41. 伊藤恒平, 伊東航, 梅津理恵, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Co-Mn-Sn 系合金粉末のマルテンサイト変態と磁気特性", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

42. 大久保亮成, 梅津理恵, 長迫実, 小林恒誠, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co2(Ti1-xFex)Z(Z=Al,Ga)ホイスラー合金の相安定性と磁気的性質", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学 2008 年 3 月 26 日~28 日

43. 宮本隆史, 伊東航, 長迫実, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Mn-In3元系状態図の実験的決定", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

44. 村上恭和, 進藤大輔, 貝沼亮介, 及川勝成, 石田清仁, "TEM による $Ni_{51}Fe_{22}Ga_{27}$ 合金の巨視的パターン形成の評価2", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

45. 高木隆光, 須藤祐司, 鈴木正夫, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "医療用 Ti-Ni 合金ワイヤーの耐食性劣化" 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵野工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

46. 小山敏幸, 小野寺秀博, "転位および界面析出に対する Phase-field シミュレーション", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

47. 小山敏幸, "Phase-field Secant 法に基づく応力-歪曲線の計算", 日本鉄鋼学会 第 155 回 2008 年春季講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日.

48. 小山敏幸, "鉄合金における Phase-field 組織形成シミュレーション",日本鉄鋼学会 第 155 回 2008 年春季講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日.

49. 小山敏幸, "複相組織の強度・延性特性の理論予測",日本鉄鋼学会 第155回2008年春季講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

50. 大出真知子, 池田宗明, 村上秀之, 小野寺秀博, N.Garimella and Y.H.Shon, "Ni_3Al/$(Ni,Ta)_3Al$ 拡散対による化学拡散係数の測定",日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

51. 片桐昌彦, 小野寺秀博, 小川浩, "水素貯蔵材料の構造安定性",日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

52. 寺島研, 大谷博司, 長谷部光弘, "Co-Hf-Sn3元系ホイスラー相のモデリングと状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

53. 中間優, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Ti-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

54. 山田健太, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Mo-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

55. 野崎祐志, 大谷博司, 長谷部光弘, "Mg-Ni-H3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

56. 西原裕司, 大谷博司, 長谷部光弘, "Pu-C2元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2008 年春期(第 142 回)講演大会, 武蔵工業大学, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

57. 大谷博司, "第一原理計算による鋼中介在物の熱力学的物性値の予測",日本鉄鋼協会 第 155 回 2008 年春季講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

58. 木村好里, 魚谷洋輔, 大谷博司, 八島正知, 三島良直, "$E2_1$ 型 M_3AlC_{1-X}(M=Fe, Co, Ni)におけるC原子と空孔の役割", 日本金属学会 2008年春期(第142回)講演大会, 武蔵工業大学, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

59. T. Tokunaga, M. Ohmichi, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Effect of the Addition of Niobium and Titanium on the Diffusion Behaviour at the Interface between Ni-based Self-Fluxing Alloy Coatings and a Steel Plate", 第 155 回日本鉄鋼協会 2008 年春季講演大会, 武蔵工業大学, 2008 年 3 月 26 日~28 日

60. 伊東航, 梅津理恵, 伊藤恒平, 小山佳一, 藤田麻哉, 及川勝成, 渡辺和雄, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁, "強磁場下における NiCoMnIn メタ磁性形状記憶合金のマルテンサイト変態挙動"

日本物理学会春季大会, 近畿大学東大阪本部キャンパス, 2008 年 3 月 22 日~25 日

61. 諏訪嘉宏, 小野寺秀博, 齊藤良行, "集合組織を考慮した三次元粒成長の Phase-field シミュレーション", 日本機械学会第20回計算力学講演会, 京田辺市, 2007 年 11 月 27 日

62. 小山敏幸, "Ni 基耐熱合金における γ'(D022)析出組織形成の Phase-field シミュレーション", 第 20 回計算力学講演会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2007 年 11 月 26 日~28 日

63. 阿部太一, 下野昌人, 橋本清, 小野寺秀博, "Al-Ni-Zr 合金におけるガラス形成能の予測", 日本学術会議材料工学連合講演会, 京都, 2007 年 11 月

64. 小林恒誠, 及川勝成, 石田清仁, "Co-Mn, Co-V 系の磁気変態に沿った2相分離の拡散対による検討", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

65. 村上恭和, 進藤大輔, 貝沼亮介, 及川勝成,石田清仁, "$Ni_{51}Fe_{22}Ga_{27}$ 合金のマルテンサイト変態に先立つ変調構造の解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

66. 友重竜一, 山形雄一, 及川勝成, 石田清仁, "チタン炭硫化物の燃焼合成過程における初期温度の効果", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

67. 三枝拓朗, 高久佳和, 大森俊洋, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ag-Cu-Ni 系液相 2 相分離型合金による導電性フィラーの試作", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

68. 品川一矢, 大森俊洋, 佐藤順, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al-W 合金の Ni 置換による γ'相の安定性", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

69. Y.-W. Cui, R. Kato, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida "Diffusional Mobility of Co-Al, Fe-Al and Co-Fe Alloys Having B2-ordered Structure", 日日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

70. 櫻田優樹, 高久佳和, 大沼郁雄, 石田清仁, "低融点はんだを利用したPbフリー耐熱接合材の試作", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

71. 知念響, 佐藤順, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-W-Ta 合金における相平衡と $L1_2$ 化合物の相安定性", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

72. 加藤亮介, 崔予文, 大森俊洋, 大沼郁雄, 貝沼亮介,石田清仁, "Co-Al2元系合金の γ 単相における拡散", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

73. 森戸春彦, 藤田麻哉, 深道和明, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, 鹿又武, "Ni-Fe-Ga-Co 合金における結晶磁気異方性の圧力依存性", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

74. 牧野孔明, 高久佳和, 大沼郁雄, 石田清仁, "Bi/Cu の接合強度と接合界面形態の関係", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

75. 梅津理恵, 長迫実, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 石田清仁, "Fe_2YZ(Y=Cr, Co, Z=Al, Ga)ホイスラー合金の相状態と磁気的性質", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

76. 高久佳和, 山中智仁, 牧野孔明, 大沼郁雄, 山田靖, 八木雄二, 中川郁朗, 渥美貴司, 石田清仁, "Zn-Al-Ni 元系の実験状態図の作成と Zn-Al 基高温はんだ冷熱サイクル試験", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

77. Y.-W. Cui, R. Kato, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida "Diffusional Mobility of Co-Al, Fe-Al and Co-Fe Alloys Having B2-ordered Structure", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

78. 伊藤恒平, 伊東航, 梅津理恵, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Mn-Sn 系合金のマルテンサイト変態と磁気特性", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

79. 伊東航, 梅津理恵, 伊藤恒平, 小山佳一, 藤田麻哉, 及川勝成, 渡辺和雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "NiNoMnIn メタ磁性形状記憶合金におけるマルテンサイト変態の異常挙動", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

80. J.-J. Wang, K. Oikawa, N. Kikuchi, T. Sakurai, S. Okamoto, O. Kitakami and K. Ishida "Effects of film thickness and W content on structure and magnetic anisotropy of Co-W films" 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

81. 高木隆光, 須藤祐司, 鈴木正夫, 貝沼亮介, 太田信, 山内清, 石田清仁, "Ti-Ni-Nb 合金を用いた自立機能型ステントの開発と機能性評価", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

82. 小山敏幸, 小野寺秀博, "強誘電体の構造相転移に対する Phase-field シミュレーションと誘電特性解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日.

83. 阿部太一, 下野昌人, 橋本清, 小野寺秀博, "Al-Ni-Zr 合金におけるガラス形成能の予測", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

84. 諏訪嘉宏, 小山敏幸, 小野寺秀博, 齊藤良行, "Ostwald 成長する分散粒子を含む系における粒成長シミュレーション",日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

85. 大出真知子, 阿部太一, 原徹, 村上秀之, 御手洗容子, 小野寺秀博, "Al-Ir 2元系状態図の実験的決定"日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

86. 大出真知子, 池田宗明, 村上秀之, 小野寺秀博, N.Garimella and Y.H.Shon, "Ni_3Al/$(Ni,Ir)_3Al$ 拡散対による化学拡散係数の測定", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

87. 野崎祐志, 大谷博司, 長谷部光弘, "Ti-Ni-H3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

88. 中島一喜, 大谷博司, 長谷部光弘, "Mg-Zn-Nd3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

89. 西原裕司, 大谷博司, 長谷部光弘, "U-B-C3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

90. 浮田周佑, 大谷博司, 長谷部光弘, "V-H2元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

91. 馬場淳, 大谷博司, 長谷部光弘, "MOX 燃料系における酸素ポテンシャルの熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)講演大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

92. 寺島研, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Zr-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 154 回 2007 年秋季大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

93. 中間優, 吉富桂太, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Nb-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 154 回 2007 年秋季大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

94. 山田健太, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Cr-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会第 154 回 2007 年秋季大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

95. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Co-B3元系における相平衡の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 154 回 2007 年秋季大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

96. 吉富桂太, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Cr-Ni-B4元系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 154 回 2007 年秋季大会, 岐阜大学, 2007 年 9 月 19 日~21 日

97. 大森俊洋, 安藤佳祐, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al 合金の高温形状記憶効果",日本機械学会 2007 年度年次大会, 関西大学, 2007 年 9 月 9 日~12 日

98. J.-J. Wang, K. Oikawa, N. Kikuchi, T. Sakurai, S. Okamoto, O. Kitakami, K. Ishida, "Magnetic anisotropy of epitaxial Co-W films on MgO(111) ", 第 31 回日本応用磁気学会, 学習院大学, 2007 年 9 月 11 日~14 日

99. 田中優樹, 及川勝成, 須藤祐司, 大森俊洋貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Ni-Al 基強磁性形状記憶合金における超弾性特性", 日本機械学会 2007 年度年次大会, 関西大学, 2007 年 9 月 9 日~12 日

100. 大森俊洋, 安藤佳祐, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "fcc/hcp マルテンサイト変態を利用した Co-Al2元系合金における形状記憶効果", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

101. 安藤佳祐, 大森俊洋, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al 基合金の高温形状記憶効果とマルテンサイト変態", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

102. 田中優樹, 及川勝成, 須藤祐司, 大森俊洋, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Ni-Al 基強磁性形状記憶合金における超弾性特性", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

103. 及川勝成, 森戸春彦, 須藤祐司, 大森俊洋, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga 系強磁性形状記憶合金の開発"先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

104. 石川博康, 須藤祐司, 大森俊洋, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "Pd-In-Fe 合金の相平衡とマルテンサイト変態", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

105. 伊東航, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "NiMnIn 基合金におけるメタ磁性形状記憶効果", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

106. 須藤祐司, 鈴木正夫, 古川明久, 山内清, "Ti-Mo-Sn 合金製チューブの機械的性質に及ぼす熱処理の影響", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

107. 森戸春彦, 及川勝成, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 深道和明, 石田清仁, "強磁性形状記憶合金の応力印加型磁場誘起歪み", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗ

ﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

108. 高木隆光, 須藤祐司, 鈴木正夫, 貝沼亮介, 石田清仁, 山内清, "バルーン拡張 Ti-Ni-Nb 超弾性ステントの開発", 先進機能材料・先進構造材料の開発・評価・応用に関するｺﾗﾎﾞﾚｰｼｮﾝ・ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ, 沖縄県石垣市, 2007 年 6 月 15 日~16 日

109. 阿部太一, 下野昌人, 橋本清, 諏訪嘉宏, 小野寺秀博, "Zr 基三元合金におけるガラス形成能の評価", 粉体粉末冶金協会春季講演大会, 東京, 2007 年 6 月

110. 阿部太一, 橋本清, 諏訪嘉宏, 小野寺秀博, 山崎政義, "NIMS 熱力学データベースの紹介", 学振第172委員会, 東京, 2007 年 5 月 25 日

111. 寺田賢二郎, 田端大人, 渡邊育夢, 秋山雅義, 堤成一郎, "マルチスケール塑性加工解析による多結晶金属材料の降伏挙動評価", 日本計算工学講演会論文集, Vol.12, No.1, 321--324, 日本計算工学会, 第 12 回計算工学講演会, 東京, 2007 年 5 月

112. 須藤祐司, 大森俊洋, 山内清, 貝沼亮介, 肥田直樹, 石田清仁, "ベイナイト変態を利用した高強度 Cu-Al-Mn 系超弾性合金の開発", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

113. 大森俊洋, 須藤祐司, 山内清, 貝沼亮介, 石田清仁, "制振特性におけるマルテンサイトバリアントの役割", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

114. 貝沼亮介, 伊東 航, 及川勝成, 石田清仁, "NiMn 基メタ磁性形状記憶合金", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

115. Y.-W. Cui, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma, and K. Ishida "Computational Study of Atomic Mobility for Co-based High Temperature Alloy Systems", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

116. 梅津 理恵, 小林恒誠, 藤田 麻哉, 貝沼 亮介, 石田 清仁, 佐久間昭正, "$L2_1$ 相 Co2(V1-x Mnx)Ga ホイスラー合金の相安定性と磁気的性質", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

117. 安藤佳祐, 大森俊洋, 須藤祐司, 及川勝成,貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Al 合金の高温形状回復特性に及ぼす hcp 安定化元素の影響", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

118. 石川博康, 須藤祐司, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "Pd-In-Fe 3 元系状態図の実験的決定", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

119. 伊東航, 梅津理恵, 伊藤恒平, 須藤祐司, 小山佳一, 及川勝成, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁, "$Ni_{45}Co_5Mn_{36.7}In_{13.3}$ メタ磁性形状記憶合金の巨大磁気抵抗効果", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

120. 萩沢武仁, 三枝拓朗, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Fe-Mn-Al-Bi 合金の結晶粒成長に及ぼす液相粒子の影響", 日本鉄鋼協会 第153回2007年春期講演大会, 千葉工業大学, 3 月 27 日~29 日

121. 大谷博司, 徳永辰也, 長谷部光弘, "Mg-Zn-RE 系合金における準安定構造の熱力学的安定性", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

122. 浮田周佑, 田中敬章, 大谷博司, 長谷部光弘, "Ti-Zr-H3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

123. 中島一喜, 西村雅俊, 大谷博司, 長谷部光弘, "Al-Cu-Mg-Si4元系状態図の熱力学的解析",

日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

124. 徳永辰也, 浮田周佑, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Zr-H4元系における相平衡の熱力学的計算", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

125. 吉富桂太, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-B-C3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2007 年春期(第 140 回)講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

126. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Mn-P3元系状態図の熱力学的解析",日本鉄鋼協会第 153 回 2007 年春期講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

127. 田中浩司, 与語康宏, 原昌司, 中西広吉, Carlos Capdevila, "初析フェライトの等温変態モデルと CALPHAD 法を援用した計算(鍛造用非調質鋼の統合相変態モデリング 第1報)", 日本鉄鋼協会 第 153 回春期講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

128. 田中浩司, 与語康宏, 原昌司, 中西広吉, "初析フェライト/パーライト/ベイナイト体積率の計算予測と実験検証(鍛造用非調質鋼の統合相変態モデリング 第2報)", 日本鉄鋼協会 第 153 回春期講演大会, 千葉工業大学, 2007 年 3 月 27 日~29 日

129. 梅津理恵, 小林恒誠, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 石田清仁, 佐久間昭正, "Co2(V1-xMnx)Gaホイスラー合金の磁気的性質と電子状態", 2007年物理学会春季大会, 鹿児島, 2007 年 3 月 18 日~21 日

130. 伊東航, 梅津理恵, 須藤祐司, 小山佳一, 及川勝成, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁, "Ni-Mn-In 基メタ磁性形状記憶合金の磁性" 2007 年物理学会春季大会, 鹿児島, 2007 年 3 月 18 日~21 日

131. 高久佳和, 大沼郁雄, 石田清仁, 山田靖, 八木雄二, 西部祐司, "パワー半導体デバイス実装高温鉛フリーはんだの接合性と信頼性", ㈳エレクトロニクス実装学会: ハイブリットカーや省エネルギー機器のコアとなるパワーエレクトロニクスの実装技術と信頼性に関する討論会, 東京, 2007 年 3 月 6 日

132. 高久佳和, 牧野孔明, Fericia Lazuardi, 大沼郁雄, 石田清仁, "Zn-Al 基鉛フリー高温はんだとCu および Ni 基板との界面反応", Mate 2007, 横浜市, 2007 年 1 月 31 日~2 月 2 日

133. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Ti-Zr4元系における相平衡とガラス形成能の熱力学的評価", 第 50 回日本学術会議材料工学連合講演会, 京大会館, 2006 年 12 月 13 日~14 日

134. 高久佳和, 大沼郁雄, 山田靖, 八木雄二, 西部祐司, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "パワー半導体デバイス実装用Biはんだ, (I)組織・機械的性質・界面反応", 第 16 回マイクロエレクトロニクスシンポジウム(MES2006), 大阪, 2006 年 10 月 26 日

135. 及川勝成, 今野陽介, 伊東航, 須藤祐司, 森戸晴彦, 岡本聡, 北上修, 藤田麻哉, 貝沼亮介, 鹿又武, 石田清仁,「$Ni_4Co_7Mn_{39}Sn_{11}$ ホイスラー合金のメタ磁性形状記憶効果」, 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

136. 勝又茂彰, 及川勝成, 大沼郁雄, 石田清仁, 貝沼亮介, "Fe-S 及び Cu-S 系状態図の熱力学的解析", 第 139 回日本金属学会 2006 年秋期大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

137. M. Jiang, J. Sato, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "A thermodynamic analysis of the Co-Al-W system", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~8 日

138. Y.-W. Cui, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Atomic mobility for fcc phase

of Co(Cr, Fe, and Ni) binaries : a computational study", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

139. 高久佳和, 牧野孔明, Felicia Lazuardi, 大沼郁雄, 石田清仁, "Zn-Al 基鉛フリー高温はんだと基板間の界面反応(1)Cu 基板", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

140. 加藤亮介, 知念響, 佐藤順, 大森俊洋, 森戸晴彦, 藤田麻哉, 深道和明, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga-Co 合金の応力印加型巨大磁場誘起歪み", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

141. 安藤佳祐, 大森俊洋, 佐藤順, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "fcc/hcp マルテンサイト変態を有する Co-Al 合金の形状記憶特性に及ぼす添加元素の影響", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~8 日

142. 伊東航, 今野陽介, 貝沼亮介, 須藤祐司, 及川勝成, 石田清仁, "NiCoMnIn メタ磁性形状記憶合金のマルテンサイト変態と磁気変態挙動", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

143. 佐藤恵理, 伊東航, 須藤祐司, 大森俊洋, 貝沼亮介, 石田清仁, "AuCuAl 系合金のマルテンサイト変態と形状記憶効果", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

144. 知念響, 佐藤順, 大森俊洋, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-W-Ge 合金における L12 型3元化合物相の析出", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

145. 牧野孔明, 高久佳和, 大沼郁雄, 石田清仁, "Zn-Al 基鉛フリー高温はんだと基板間の界面反応(2)Ni 基板", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

146. 高木隆光, 須藤祐司, 鈴木正夫, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "Ti-Ni 合金の耐食性に与える表面皮膜の影響", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

147. 萩沢武仁, 大沼郁雄, 石田清仁, 貝沼亮介, "Zn-Bi 系液相粒子分散組織における結晶粒成長", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

148. 勝又茂彰, 及川勝成, 大沼郁雄, 石田清仁, 貝沼亮介, "Fe-S 及び Cu-S 系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2006 年秋期講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

149. 中島一喜, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Be-Mo2元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

150. 浮田周佑, 大谷博司, 長谷部光弘, "M(Nb,Zr)-H2元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

151. 西村雅俊, 大谷博司, 長谷部光弘, "Al-Cu-Mg3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

152. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Ti-Zr4元系における相平衡の熱力学的計算", 日本金属学会 2006 年秋期(第 139 回)講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

153. 吉冨桂太, 大谷博司, 長谷部光弘, "NaCl 型複合炭窒化物の熱力学的物性の評価",日本鉄鋼協会 第 152 回 2006 年秋季講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

154. 阿部幸佑, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-B-C3元系状態図の複合炭窒化物の熱力

学的物性の評価",日本鉄鋼協会 第 152 回秋季講演大会, 新潟大学, 2006 年 9 月 16 日~18 日

155. 貝沼亮介, 今野陽介, 伊東航, 須藤祐司, 森戸晴彦, 岡本聡, 北上修, 及川勝成, 藤田麻哉, 鹿又武, 石田清仁, "Ni-Mn-In-Co 合金におけるメタ磁性形状記憶効果", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

156. 大沼郁雄, 高久佳和, 貝沼亮介, 石田清仁, "Zn 基合金の熱力学データベースの開発と合金設計への応用", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

157. 及川勝成, 今野陽介, 伊東航, 須藤祐司, 森戸晴彦, 岡本聡, 北上修, 貝沼亮介, 藤田麻哉, 鹿又武, 石田清仁, "$Ni_{46}Mn_{41}In_{13}$ 合金のマルテンサイト変態に及ぼす磁場の効果", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

158. M. Jiang, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "A thermodynamic Recalculation of the Ni-Al Phase Diagram by a CALPHAD Approach", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

159. 高久佳和, 大沼郁雄, 山田靖, 八木雄二, 西部祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "複合組織型 Bi 高温鉛フリーはんだの合金設計と冷熱サイクル信頼性", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

160. 森戸春彦、藤田麻哉, 深道和明, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga 合金における結晶磁気異方性の Co 部分置換の影響" 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

161. 伊東航, 今野陽介, 須藤祐司, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Mn-In 合金のマルテンサイト変態と磁気特性", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

162. 高木隆光, 須藤祐司, 貝沼亮介, 山内清, 石田清仁, "Ti-Ni-Nb 合金の耐食性及び生体適合性", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

163. 貝沼亮介, 及川勝成, 石田清仁, "Ni 基磁性形状記憶材料の合金設計", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

164. 徳永辰也, 花谷尚子, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Cr-P3元系状態図の熱力学的解析", 日本鉄鋼協会 第 151 回 2006 年春季講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

165. 松本智史, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Zr3元合金のアモルファス形成能の評価", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

166. 阿部幸佑, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Ni-Cr-B3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

167. 西村雅俊, 柳龍治, 大谷博司, 長谷部光弘, "Al-Mg2元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

168. 大谷博司, 柳龍治, 長谷部光弘, "GP ゾーンを形成する2元系合金の準安定状態図の計算" 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

169. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "金属ホウ化物の生成エネルギーの第一原理計算", 日本金属学会 2006 年春期(第 138 回)講演大会, 早稲田大学, 2006 年 3 月 21 日~23 日

170. 平田直哉（東北大学大学院工学研究科院生）, "湯流れ挙動に及ぼす表面張力の影響", 日本鋳造工学会第 147 回全国講演大会, 札幌, 2005 年 10 月 28 日~31 日

171. 貝沼亮介, 及川勝成, 須藤祐司, 石田清仁, "Ni 基強磁性形状記憶材料の合金設計", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

172. 今野陽介, 森戸春彦, 及川勝成, 大森俊洋, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga-Co 合金の相安定性", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

173. 森戸春彦, 今野陽介, 藤田麻哉, 深道和明, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga-Co 合金の結晶構造および磁気特性における組成依存性",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

174. 田中優樹, 及川勝成, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Ni-Al 基強磁性形状記憶合金における超弾性特性", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

175. 及川勝成, 光井啓, 石田清仁, "Fe-Cr-Mn-Ni-Ti-S-C-N 系熱力学データベースの開発", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

176. 須藤祐司, 山内清, 高木隆光, 鈴木正夫, 前島貴志, 西田稔, "Ti-Mo-Sn 合金チューブの機械的性質に及ぼす熱処理の影響", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

177. 須藤祐司, 山内清, 高木隆光, 鈴木正夫, 前島貴志, 西田稔, "Ti 基合金をコア材とした新しい医療用ガイドワイヤーの創製", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

178. 大森俊洋, 肥田直樹, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "マルテンサイトを利用した制振合金における結晶構造と現衰能の関係", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

179. M. Jiang, J. Sato, I. Ohnuma, R. Kainuma,,K. Ishida, "Thermodynamic Descriptions of the Fe-W-X(X: Co and Ni) System", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

180. C. Zhamin, T. Yoshikazu, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Thermodynamic Optimization of Ni-X(X=Bi, In, Sb) Systems", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

181. S. Farjami, T. Koyama, R.Kainuma, K. Ishida, "Phase-field Simulation of Dragging of Liquid Bi Prticles by Grain Boundary Movement in Al-Bi System", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

182. R. Ducher, I. Ohnuma, R, Kainuma, K. Ishida, "Experimental Study on Phase Equilibria in the Ni-rich Part of Ni-Ga Binary System", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

183. 森戸春彦, 今野陽介, 藤田麻哉, 深道和明, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "NI-Fe-Ga-Co 合金の結晶構造及び磁気特性における組成依存性", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

184. 今野陽介, 森戸春彦, 及川勝成, 大森俊洋, 須藤祐司, 貝沼亮介, 石田清仁, "Ni-Fe-Ga-Co 合金の相安定性", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

185. 田村浩一, 佐藤順, 及川勝成, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co-Cr-Fe 系合金における相平衡",

日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

186. 高木隆光, 須藤祐司, S. Farjami, 鈴木正夫, 山内清, 貝沼亮介, 石田清仁, "超弾性 Ti-Ni-Nb 合金を用いた自律機能型ステントの開発", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

187. 正木達章, 菊池麻樹, 手束展規, 杉本諭, 猪俣浩一郎, 貝沼亮介, 石田清仁, "Co_2CrGa フルホイスラー合金薄膜を用いた強磁性トンネル接合素子の作製", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

188. 神谷尚秀, 海野玲子, 須藤祐司, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Fe-Mn-Al-C 系における相平衡", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

189. 佐々木智之, 光井啓, 及川勝成, 大沼郁雄, 貝沼亮介, 石田清仁, "Fe-V-S3元系合金における相平衡", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

190. 花谷尚子, 大谷博司, 長谷部光弘, "第一原理計算を応用した多元系 Fe 合金状態図のデータベース構築", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

191. 阿部幸佑, 大谷博司, 長谷部光弘, "Si-C-Ti-X（X=Cu, Ni）4元系状態図の熱力学的計算", 日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

192. 松本智史, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Zr3元系状態図の熱力学的解析",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会,, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

193. 西村雅俊, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Be-Ti-V3元系状態図の熱力学的解析",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

194. 木村良, 大谷博司, 長谷部光弘, "Si-C-X3元系状態図の熱力学的計算",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

195. 柳龍治, 大谷博司, 長谷部光弘, "Cu-Be2元系状態図の熱力学的解析",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

196. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "3d 遷移金属ホウ化物の生成エネルギーの第一原理計算", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島大学, 2005 年 9 月 28 日~30 日

197. 小山敏幸, "材料の組織と特性予測における計算工学的手法に対する基本的考え方", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

198. 小野寺秀博, "計算材料科学の現状と展望", 日本鉄鋼協会第 150 回秋季講演大会, 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

199. 橋本清, " Phase-field プログラムと熱力学データベースとのインターフェース", 日本鉄鋼協会第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

200. 阿部太一, 大出真知子, 村上秀之, Chang-Seok Oh, C.Kocer, 小野寺秀博, "Al-Ir 二元状態図の熱力学評価", 日本鉄鋼協会 第 150 回 2005 年秋季講演大会, 広島, 2005 年 9 月 28 日~30 日

201. 西村雅俊, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "第一原理計算を援用した Be-Ti-V3元系状態図の計算", 日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会, 福岡, 2005 年 6 月 10 日

202. 阿部幸佑, 大谷博司, 長谷部光弘, "Si-C-Ti-X（X=Cu, Ni）4元系状態図の熱力学的計算" 日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会, 福岡, 2005 年 6 月

10 日

203. 木村良，大谷博司，長谷部光弘，"Si-C-X（X=Cr，V）3元系状態図の熱力学的計算"，日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会，福岡，2005 年 6 月 10 日

204. 花谷尚子，大谷博司，長谷部光弘，"IF 鋼における Ti 及び Nb 系炭窒化物と燐化物の析出挙動，日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会，福岡，2005 年 6 月 10 日

205. 柳龍治，大谷博司，長谷部光弘，"Al-Cu2元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会，福岡，2005 年 6 月 10 日

206. 平田直哉（東北大学大学院工学研究科院生），"表面張力を考慮したダイカスト薄肉部の流動解析"，日本鋳造工学会第 146 回全国講演大会，東京，2005 年 5 月 27 日~30 日

207. 阿部太一，下野昌人，大出真知子，小野寺秀博，"会合溶体モデルによる過冷却液相のモデリング"，日本金属学会 2005 年春期(第 136 回)講演大会，横浜，2005 年 3 月 29 日~31 日

208. 花谷尚子，大谷博司，長谷部光弘，"Fe-Nb-P3元系状態図の熱力学的解析"，日本鉄鋼協会 第 149 回 2005 年春季講演大会，横浜国立大学，2005 年 3 月 29 日~31 日

209. 徳永辰也，西村雅俊，大谷博司，長谷部光弘，"Ti-Be および V-Be2元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会 2005 年春期(第 136 回)講演大会，横浜国立大学，2005 年 3 月 29 日~31 日

210. 松本智史，大谷博司，長谷部光弘，"Nb-Ni-Ti3元系における相境界の実験的決定とその熱力学的解析"，日本金属学会 2005 年春期(第 136 回)講演大会，横浜国立大学，2005 年 3 月 29 日~31 日

211. 柳龍治，大谷博司，長谷部光弘，"Al-Cu2元系合金における準安定構造の溶解度の計算"，日本金属学会 2005 年春期(第 136 回)講演大会，横浜国立大学，2005 年 3 月 29 日~31 日

212. 木村好里，坂井喜一，大谷博司，三島良直，"金属間化合物 Co_3AlC における C 原子の規則化－$E2_1$型構造と$L1_2$型構造の類似性－"，日本金属学会 2005 年春期(第 136 回)講演大会，横浜国立大学，2005 年 3 月 29 日~31 日

213. 大出真知子，阿部太一，村上秀之，大沼郁雄，石田清仁，小野寺秀博，"Sn-Ag-Cu 系鉛フリーはんだ共晶率の数値的予測"，Mate2005(エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術シンポジウム)，溶接学会，パシフィコ横浜，2005 年 2 月 3 日~4 日

214. 徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"CALPHAD 法を援用した Fe-Si-B および Ni-Si-B3 元合金のアモルファス形成能の評価"，日本学術振興会合金状態図第 172 委員会研究報告書，湯布院，2004 年 12 月 10 日~11 日

215. 平田直哉，澤田朋樹，八百川盾，安斎浩一，"フローはんだ流動シミュレーションの試み"，日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会，秋田，2004 年 9 月 29 日

216. 土肥広大，大谷博司，長谷部光弘，"Sn-Zn-Ti3元系状態図の相平衡"，日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会，秋田大学，2004 年 9 月 28 日~30 日

217. 大道雅幸，徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"Ni 基溶射皮膜界面での浸炭と添加元素による抑制効果"，日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会，秋田大学，2004 年 9 月 28 日~30 日

218. 山野万紀，大谷博司，長谷部光弘，"Fe-Mn-Al-C4元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会，秋田大学，2004 年 9 月 28 日~30 日

219. 花谷尚子，大谷博司，長谷部光弘，"Fe-Ti-P3元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会，秋田大学，2004 年 9 月 28 日~30 日

220. 松本智史, 大谷博司, 長谷部光弘, "Nb-Ni-Ti3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会秋期大会, 秋田大学, 2004 年 9 月 28 日~30 日

221. 柳龍治, 大谷博司, 長谷部光弘, "Cu-Be2元系状態図の熱力学的解析と準安定析出物について", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 秋田大学, 2004 年 9 月 28 日~30 日

222. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "CALPHAD 法を適用した Ni-Si-B3元系合金のガラス形成能の評価", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 秋田大学, 2004 年 9 月 28 日~30 日

223. 大谷博司, 柳龍治, 長谷部光弘, "Cu-Be2元系状態図と準安定析出物について", 日本学術振興会合金状態図第 172 委員会研究報告書, 東京, 2004 年 6 月 18 日

224. 大谷博司, 末松壮一郎, 長谷部光弘, "Cu-Be-Ni-Co-Fe 系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

225. 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Si-B3元系における相平衡", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

226. 山野万紀, 大谷博司, 長谷部光弘, "Fe-Al-C3元系状態図の熱力学的解析", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

227. 塚本晋也, 大谷博司, 長谷部光弘, "4副格子モデルを用いた Ni-Ti2元系状態図の計算", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

228. 土肥広大, 大谷博司, 長谷部光弘, "Sn-Zn-Ti3元系状態図の実験的検討", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

229. 大道雅幸, 羽島浩司, 徳永辰也, 大谷博司, 長谷部光弘, "Ni 基自溶合金溶射皮膜の相平衡と皮膜界面における拡散挙動", 日本金属学会 2004 年秋期(第 135 回)講演大会, 東京工業大学, 2004 年 3 月 30 日~4 月 1 日

② 口頭発表 (国際会議)

1. Y. TAKAKU, Y. SAKURADA, I. OHNUMA and K. ISHIDA, " Development of Pb-free heat resistant joints using Sn-Bi powders and Ag powders", 2009 TMS annual meeting, San Francisco,USA, Feb.15~19, 2009

2. K. Ishdia, "Intermetallic Compounds in Co-base Alloys-Phase Stability and Application to Superalloys-", 2008 Materials Research Society(MRS) Fall Meeting, Boston, USA, Dec.1~5, 2008

3. T. Omori, K. Makino, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase stability of γ' phase in Ir-Al-W ternary system", MRS2008, Boston, USA, Dec. 1~5, 2008

4. H. Chinen, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase stability of $L1_2$ compound and microstructural change in Co-(W or Mo)-Ta ternary alloys", MRS2008, Boston, USA., Dec. 1~5, 2008

5. K. Tanaka, M. Hara, Y. Yogo, K. Nakanishi, "CALPHAD-assisted Simulation of Phase Transformations on Cooling of Medium-carbon Forging Steel", 17th IFHTSE Congress 2008, Kobe, October 28-30, 2008

6. T. Omori, Y. Sutou, N. Tabata, K. Hayasaka, M. Ishibashi, T. Suetake, R. Kainuma and K. Ishida, "Ingrown Nail Correcting Device Using Cu-Al-Mn Shape Memory Alloy", SMST2008 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Italy, Sep. 21~26, 2008

7. Y. Tanaka, K. Oikawa, Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida "Superelasticity and Srain-induced Magnetization Change of Ferromagnetic Co-Ni-Al Shape Memory Alloy", SMST2008 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Italy, Sep. 21~26, 2008
8. K. Ishida, "Development of Thermodynamic Database for Cu-base Alloy Systems and Micro-Solders", MSE2008 (Materials Science and Engineering), Nürnberg, Germany, Sep. 1~5, 2008
9. Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, Y. Yamauchi and K. Ishida, "Medical guidewire with functionally graded properties using Cu-Al-Mn-based superelastic alloy", MSE2008 (Materials Science and Engineering), Nürnberg, Germany, Sep. 1~5, 2008
10. T. Omori, Y. Sutou, N. Tabata, K. Hayasaka, M. Ishibashi, T. Suetake, R. Kainuma and K. Ishida, "New Type of Ingrown Nail Correcting Clip Using Cu-Al-Mn Superelastic Alloy", MSE 2008 (Materials Science and Engineering), Nürnberg, Germany, Sep. 1~5, 2008
11. Y. Murakami, D. Shindo, R. Kainuma, K. Oikawa and K. Ishida, "CHANGE IN MAGNETIC MICROSTRUCTURE NEAR THE MARTENSITIC TRANSFORMATION IN A Ni-Fe-Ga ALLOY", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA, June 27~July 5, 2008
12. M. Nagasako, W. Ito, R. Umetsu, K. Ito, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase Separation and Martensitic Transformation in Heusler-type NiMnSb Alloys", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA, June 27~July 5, 2008
13. T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Origin of High Internal Friction in Martensite Phase of Cu-Al-Mn-based Alloys", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA, June 27~July 5, 2008
14. H. Morito, K. Oikawa, A. Fujita, K. Fukamichi, R. Kainuma, and K. Ishida, "Stress-assisted magnetic-field-induced strain in the Co-Ni-Ga ferromagnetic shape memory alloy", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA., June 27~July 5, 2008
15. K. Ando, T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "High Temperature Shape Memory Effect in Co-Al Based Ternary Alloys with HCP Stabilizing Elements", ICOMAT2008 (International Conference on Martensitic Transformations), Santa Fe, USA, June 27~July 5, 2008
16. Kenjiro Terada, "A method of numerical material testing for composite materials", 8th. World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, June 30~July 5, 2008
17. Y. Takaku, I. Ohnuma, Y. Yamada, Y. Yagi, I. Nakagawa and T. Atsumi, "High Temperature Bi-Based and Zn-Based solders for Semiconductor Power Devices", TOFA2008 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), Krakow, Poland, June 22~27, 2008
18. I. Ohnuma, T. Saegusa, Y. Takaku, R. Kainuma and K. Ishida, "Microstructural Evolution of Alloy Powder for Electronic Materials with Liquid Miscibility Gap", CALPHADXXXVII, Saariselkä, Finland, June 15~20, 2008
19. K. Oikawa, K. Anzai, J. Sato, K. Kobayashi, T. Omori, I. Ohnuma and K. Ishida, "Experimental

reexamination of Co-V system", CALPHADXXXVII, Saariselkä, Finland, June 15~20 2008

20. 阿部太一, 大出真知子, Cenk Kocer, 御手洗容子, 村上秀之, "Al-Ir 二元系合金状態図の熱力学解析", CALPHAD, Saariserka, Finland, June 15~20, 2008

21. Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, Y. Yamauchi and K. Ishida, "Development of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys -Application to Medical Guide Wire-", CIMITEC2008 (The 3rd International Conference "Smart Materials, Structures and Systems"), Acireale, Sicily, Italy, June 8~13, 2008

22. T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Development of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys –Phase Stability and Microstructural Control-", CIMITEC2008 (The 3rd International Conference "Smart Materials, Structures and Systems"), Acireale, Sicily, Italy, June 8~13, 2008

23. K. Tanaka, M. Hara, Y. Yogo, K. Nakanishi and Carlos Capdevila, "Integrated models for predicting the effect of manganese fluctuation on the phase transformation of industrial hot-forging steels", 7th ALEMI (Alloying Element effects on Migrating phase Interfaces) workshop , Tokyo, March 27~ 28, 2008

24. M. Katagiri, H. Onodera , H. Ogawa and N. Nishikawa, "Structural Stability of Hydrogen Storage Materials", Int. Conf. on Computational & Experimental Engineering and Science (ICCES '08), Hawaii, Honolulu, USA, March 17~22, 2008

25. Y. Takaku, I. Ohnuma, Y. Yamada, Y. Yagi, I. Nakagawa, T. Atsumi and K. Ishida, "Interfacial reaction and Thermal Fatigue of Zn-4wt.%Al-1wt.%Cu/Ni Couples", TMS 2008 Annual Meeting & Exhibition, New Orleans, USA, March 9~13, 2008

26. I. Watanabe, K. Terada, D. Peric, E. A. de Souza Neto, "Two-scale characterization of macroscopic tensile strength of polycrystalline metals with an elastic-plastic-damage constitutive model for single crystal", Book of Abstracts, 393, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with Eleventh International Conference on the Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science, Dec. 3~ 6, 2007

27. R. Kainuma, W. Ito, K. Oikawa and K. Ishida, "Metamagnetic Shape Memory Effect in the Ni-Mn-based Heusler-Type Alloys", SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

28. Y. Sutou, A. Furukawa, M. Suzuki, K. Yamauchi and M. Nishida, "Development of Ni-free Ti-Mo-Sn-based superelastic tubes for medical devices", SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

29. T. Omori, Y. Sutou, N. Koeda, R. Kainuma and K. Ishida, "High Damping Capacity of Texture-Controlled Cu-Al-Mn-Base Shape Memory Alloys", SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

30. R. Y. Umetsu, H. Ishikawa, K. Kobayashi, A. Fujita, K. Ishida and R. Kainuma, "Magnetic properties and microstructures of $Ni_2Mn(Ga_xAl_{1-x})$ shape memory alloys" SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

31. H. Morito, K. Oikawa, A. Fujita, R. Kainuma, K. Ishida, and K. Fukamichi, "Stress-assisted magnetic-field-induced strain in Ni-Fe-Ga based ferromagnetic shape memory alloy system“,

SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

32. Y. Tanaka, Y. Himuro, Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, K. Ishida and K. Yamauchi, "Superelasticity due to γ(('thermoelastic martensitic transformation in Fe-Ni-Co-Al based Alloys″, SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

33. W. Ito, R. Y Umetsu, K.i Ito,, K.. Koyama, A. Fujita, K. Watanabe, R.e Kainuma, K. Ishida, ″Magnetic and electric properties under high magnetic field in NiCoMnIn metamagnetic shape memory alloy″, SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

34. H. Ishikawa, Y. Sutou, T. Omori, R. Y. Umetsu, K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "Martensitic Transformations and Magnetic properties in Pd-In-Fe shape memory alloys“, SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

35. K. Ando, T. Omori, J. Sato, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "High temperature shape memory effect due to fcc/hcp martensitic transformation in the Co-Al binary and Co-Al-X ternary systems", SMST2007 (The International Conference on Shape Memory and Superalastic Technologies), Tsukuba, Japan, Dec. 3~4, 2007

36. Y. Suwa, T. Koyama, Y. Saito and H. Onodera, “Phase field simulation of grain growth in dual-phase nanocrystalline materials”, APCOM’07 in conjunction with EPMESC XI, Kyoto, Dec. 3, 2007

37. Y.-W. Cui, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Simulation of Domain Morphologies for Hexagonal-Orthorhombic Polycrystals", PRICM2007 (The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing), Jeju Island, Korea, Nov. 5~9, 2007

38. K. Oikawa, J.Sato, K. Kobayashi, K.Ishida, "Magnetically Induced Miscibility Gap of Co-based Alloys", PRICM2007 (The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing), Jeju Island, Korea, Nov. 5~9, 2007

39. S. Ukita, H. Ohtani, M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Ti-Zr-H Ternary Phase Diagram", PRICM2007 (The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing), Jeju Island, Korea, Nov. 5~9, 2007

40. T. Tokunaga, H. Ohtani, M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Mn-P Ternary Phase Diagram by Combining the First-Principles and CALPHAD Methods", PRICM2007 (The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing), Jeju Island, Korea, Nov. 5~9, 2007

41. X. J. Liu, C.P. Wang, I. Ohnuma, S.L. Chen, R. Kainuma, K. Ishida and Y.A. Chang, "Development of a Materials Design Tool and Its application in Pb-free Micro-solders in Electronic Package", The 5th International Conference on Physical & Numerical Simulation of Materials Processing, Zhengzhou City, Henan Province, China, Oct. 23~27, 2007

42. T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Fundamental and Applied Aspects of Newly Developed Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys", MS&T(Materials Science & Technology 2007 Conference and Exhibition), Detroit, USA, Sep. 16~20, 2007

43. K. Terada, H. Tabata, I. Watanabe, M. Akiyama, "Characterization of Macroscopic Yield Strength of Polycrystalline Metals by Multiscale Metal Forming Analysis" Computational Plasticity -Fundamentals and Application- Part 2, Eds.: E. Onate, DRJ. Owen, B. Suarez, 350-253, IX International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS 2007), 5-7, Barcelona Spain, Sep. 5~7, 2007

44. M. Katagiri, T. Sasaki and H. Onodera, "Computer Simulation of Photocatalysts Europacat VIII", Turku Fair and Congress Center, Turku / Abo, Finland, August 26~31, 2007

45. F. gao, C.P. Wang, X.J. Liu, K. Ishida, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria and Its Applications in the Sn-Ag-Cu-Ni-Au System", 8th International Conference on Electronics Packaging Technology, Shanghai, China, August 14~17, 2007

46. Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, Y. Yamauchi and K. Ishida, "Development of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys -Application to Medical Guide Wire-", 62nd ABM'S ANNUAL INTERNATIONAL CONGRESS, Vitória, Brazil, July 23~27, 2007

47. T. Omori , Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Development of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys -Phase Stability and Microstructural Control-" 62nd ABM'S ANNUAL INTERNATIONAL CONGRESS, Vitória, Brazil, July 23~27, 2007

48. K. Terada, N. Kikuchi, "Some Applications of Numerical Material Testing with Microstructures in Nonlinear CAE", Book of Abstract 25-48, p257, Ninth U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM9), San Francisco California, July 22~ 26, 2007

49. K. Matsui, T. Koyama, K, Terada, "Multi-Scale Simulation of Material Processing by Phase-Field & Homogenization Method", Book of Abstract 25-48, 306, Ninth U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM9), San Francisco, California, July 22~26, 2007

50. M. Ode, N.Garimella, M. Ikeda, H. Murakami, H. Onodera, Y.H.Shon, "Ternary Interdiffusion in $L1_2$-Ni_3Al with Ir Alloying Addition", 3rd International Conference on Diffusion in Solids and Liquids, Alvor, Portugal, July 4~7, 2007

51. R. Tomoshige, Y. Yamagata, K.Oikawa, and K.Ishida, "T3_02 ADDITION EFFCT OF SULPHUR INTO TITANIUM-CARBON CERAMIC SYSTEM ON REACTIVITY OF COMBUSTION SYNTHESI", SHS2007, Dijon, France, July 1~5, 2007

52. I. Ohnuma, T. Hagisawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Effect of Interfacial Energy on Grain Size Correlation in Dual-phasee Structure", The ReX and GG III (The 3rd International Conference on Recrystallization and grain growth) Jeju, Korea, June 11~15 2007

53. T. Hagisawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Microstructure evolution of liquid particle dispersion structure in monotectic alloys", The ReX and GG III (The 3rd International Conference on Recrystallization and grain growth) Jeju, Korea, June 11~15 2007

54. I. Ohnuma, N. Kamiya, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic Database of High-strength Low-Density Steels", CALPHADXXXVI, Pennsylvania, USA, May 6~11, 2007

55. M. Jiang, J. Sato, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "An Estimation of the Thermodynamic Stability of γ' Co_3(Al,W) in the Co-Al-W System", CALPHADXXXVI, Pennsylvania, USA, May 6~11 2007

56. C.P. Wang, J. Wang, X.J. Liu, Y. Ma, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida ,"Experimental determination and thermodynamic calculation of the phase equilibria in the Co-Mo-X (X: Al,

Fe, Ni and W) system", CALPHADXXXVI, Pennsylvania, USA, May 6~11, 2007

57. X.J. Liu, F. Gao, C.P. Wang, Y. Ma, Y.Y. Li and K. Ishida, "Thermodynamic assessment of phase equilibria in the Sn-Ag-X (Au, Ni) system", CALPHADXXXVI, Pennsylvania, USA, May 6~11, 2007

58. T. Tokunaga, K. Terashima, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Zr-B Ternary System", CALPHAD XXXVI, State College, USA, May 6~11, 2007

59. Y. Takaku, I. Ohnuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Bi-base Composite Solders for Mounting Power Semiconductor Devices", ICEP 2007, Shinagawa Prince Hotel, Tokyo, April 18~20, 2007

60. I. Ohnuma, "An Calphad Re-assessment of the Al-Ti system", JEEP XXXIII, Lyon, France, March 28~30, 2007

61. Y. Takaku, I. Ohnuma, Z. Cao, Y. Miyabe, R. Kainuma and K. Ishida, "Experimental investigation and Thermodynamic calculation of the phase equilibria in the Sn-Ni-Bi ternary system", TMS Annual Meeting & Exhibition, Orlando, Florida, Feb. 25~March 1, 2007

62. X. J. Liu, C. P. Wang, F. Gao, Y. Y. Li, I. Ohnuma and K. Ishida, "Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Sn-Ag-Cu-Ni-Au System", TMS Annual Meeting & Exhibition, Orlando, Florida, Feb. 25~ March 1, 2007

63. R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma and K. Ishid,a "Phase Stability and magnetic properties of L21–type phase in the Co2YGa (Y = Ti, V, Cr, Mn and Fe) and Co2(V1-xMnx)Ga alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

64. Y. Sutou, T. Omori, M. Suzuki, A. Furukawa, K. Yamauchi, R. Kainuma and K. Ishida, "Mechanical Properties of Cu-Al-Mn-based alloys and their application to medical guidewire", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

65. T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Alloy Design and Microstructural Control in Ductile Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

66. M. Suzuki, Y. Sutou, T. Takagi, A. Furukawa and K. Yamauchi, "Development of balloon expandable Ti-Ni-Nb superelastic stent", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

67. A. Furukawa, Y. Sutou, M. Suzuki, K.Yamauchi, T. Takagi, and M. Nishida, "Development of Ni-free Ti-Mo-Sn superelastic alloys and their application to medical devices", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

68. M. Jiang, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Thermodynamic Description of the Martensitic Transformation in the Ni-Al System", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

69. Y. Takaku, I. Ohnuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe, Y. Sutoh, R. Kainuma and K. Ishida, "Development of Bi-base High Temperature Pb-free Solders", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

70. Y.-W. Cui, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Computational study of atomic mobility for fcc phase of Co-based binary systems", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

71. T. Hagisawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase-Field Simulation of Microstructure Evolution of Al-Bi Liquid Particle Dispersion Structure", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

72. W. Ito, R. Kainuma, Y. Sutou, K. Oikawa and K. Ishida, "Martensitic and magnetic transformation behaviors in Heusler-type NiMnIn and NiCoMnIn metamagnetic shape memory alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

73. T. Takagi, Y. Sutou, M. Suzuki, R. Kainuma, K. Yamauchi, and K. Ishida, "Effect of pre-strain on martensitic transformation in a $Ti_{47.6}Ni_{46.4}Nb_{6.0}$ superelastic alloy", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

74. K. Ando, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Effect of Alloying Elements on fcc/hcp Martensitic Transformation and Shape Memory Properties in Co-Al Alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

75. H. Ishikawa, K. Kobayashi, R. Y. Umetsu, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase stability and magnetic properties of $Ni_2MnGa_xAl_{1-x}$ Heusler alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

76. S.Katsumata, K.Oikawa, I.Ohnuma, R.Kainuma and K.Ishida, "Thermodynamic Assessment of the Fe-Cu-S System", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

77. E. Sato, W. Ito, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma and K. Ishida, "Martensitic Transformation and Shape Memory Properties in Au-Cu-Al based Alloys", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

78. H. Chinen, J. Sato, T. Omori, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "New ternary compound $Co_3(W, X)$ (X = Ge, Ta) with $L1_2$ structure", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

79. R. Kato, H. Chinen, J. Sato, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Phase equilibria in Co-rich portion of the Co-W-Ti ternary system", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

80. Y. Takaku, I. Ohnuma and K. Ishida, "Interfacial Reaction between Zn-Al base solder and Ni substrate", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications, Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

81. T. Tokunaga, N. Hanaya, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Fe-Cr-P Ternary System by Incorporating First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", Japan-China Joint Symposium on Phase Diagrams, Materials Design and Their Applications: Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

82. T. Abe, Y.Chen, Y.Mitarai and H.Numakura, "Termodynamic modeling of the fcc-orderings in

the Ir-Nb system", Japan-China Joint symposium on phase diagrams, Xiamen Univ., Xiamen, China, Nov. 8~12, 2006

83. T.Abe, M.Shimono, SR.Bonta, K.Hashimoto, K.Hono and H.Onodera, "Glass forming ability of alloys and phase separation", the 5th international conf. on bulk metallic glasses, Awaji, Japan, Oct. 1~5, 2006

84. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Evaluation of the glass-forming ability of Nb-Ni-Ti-Zr quaternary alloys using the CALPHAD approach", The 5th International Conference on Bulk Metallic Glasses (BMG-V), Awaji, Japan, Oct. 1~ 5, 2006

85. T. Abe, M. Shimono, B. Srinivasa-rao, K. Hashimoto, K. Hono and H. Onodera, "Glass forming ability of alloys and phase separation", The 5th international conf. on bulk metallic glasses, Oct., 2006

86. I. Ohnuma , Y. Takaku, K. Makino, R. Kainuma and K. Ishida, "Application of ADAMIS(Alloy Database for Micro-Solders) for Alloy Design of Zn-base High-Temperature Lead-free Solders ", HTMC-XII (High Temperature Materials Chemistry), Vienna, Austria, Sep. 17~22, 2006

87. J. Sato, K. Tamura, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, " Experimental Study and Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Co-Cr-Mo Ternary System ", HTMC-XII (High Temperature Materials Chemistry), Vienna, Austria, Sep. 17~22, 2006

88. T.Abe, Y.Chen, Y.Yamabe-Mitarai and H.Numakura, "Thermodynamic assessment of the Ir-Nb system", HTMC-XII (High Temperature Materials Chemistry), Vienna, Austria, Sep. 17~22, 2006

89. Y. Sutou, T. Omori, M. Suzuki, A. Furukawa, K. Yamauchi, R. Kainuma and K. Ishida, " Development of superelastic guidewire with functionally graded property using Cu-Al-Mn based shape memory alloy", COPPER’06, Compiegne, France, Sep. 12~15, 2006

90. T. Omori, Y. Sutou , R. Kainuma and K. Ishida, "Development of Cu-Al-Mn-Based Shape Memory Alloys", COPPER’06, Compiegne, France, Sep. 12~15, 2006

91. K. Kobayashi, K. Ishikawa, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, K. Aoki, K. Ishida, "Phase Stability of B2 and L21 Ordered Phases in Co2YZ (Y = Ti, V, Cr, Mn, Fe; Z = Al, Ga) Alloys", ICM (International Conference on Magnetism), Japan, Kyoto, August 20~25, 2006

92. K. Yamauchi, Y. Sutou, T. Takagi, M. Suzuki, R. Kainuma, T. Sakuma and K. Ishida, "Development of New Medical Metalic Stent with High Performances", Thermec’2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

93. R. Kainuma , Y. Sutou, N. Ono, and K. Ishida, " Pseudoelastic Properties and Their Evaluation in Cu-Mn-Al based Alloy Wires ", Thermec’2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

94. I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "Carbide Dispersion Carburizing (CDC) of Fe-Mo-Cr-V Based High-speed Steels", Thermec’2006(International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

95. Y. Sutou, K. Yamauchi, T. Takagi, M. Suzuki, T. Maeshima and M. Nishida, "Development of Minimally Invasive Medical Devices Using Ti-Mo-Sn Shape Memory Alloy", Thermec’2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

96. T. Omori, Y. Sutou, K. Ando, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Microstructure and Shape Memory Effect in Co-Al Alloys" Poster, Thermec'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

97. T. Abe, C. Kocer, M. Ode, C. S. Oh, H. Murakami, Y. Yamabe-Mitarai, "A Thermodynamic description of the Al-Ir binary system", Thermec'2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

98. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Computer Simulation of Grain growth in Three Dimensions by the Phase Field Model with Anisotropic Grain Boundary Mobilities", Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

99. H. Ohtani, N. Hanaya and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of Steels by Incorporating First-Principles Calculations into the CALPHAD Approach", Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

100. T. Tokunaga, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Assessment of the Al-Cr System by Combining the First Principles and CALPHAD Methods", Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006

101. I. Ohnuma, Y. Takaku, Z. Cao, R. Kainuma and K. Ishida, "Application of ADAMIS (Alloy Database for Micro-Solders) for Alloy Design of High-Temperature Lead-Free Solders ", TOFA2006 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), China, Beijing, June 18~23, 2006

102. M. Jiang, I. Ohnuma, R. Kainuma and K. Ishida, "A Thermodynamic Description of Fcc Ordering in The Ni-Al System by A CALPHAD Approach", TOFA2006 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), China, Beijing, June 18~23, 2006

103. K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "Magnetic and Marutensitic Transformation of Ni-(Co, Fe)-(Al", Ga) β Alloys", TMS Annual Meeting, USA San Antonio, Texas, March 12~16, 2006.

104. Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma, Y. Yamada, Y. Yagi, Y. Nishibe, K. Ishida, "Development of Bi-based High Temperature Pb-free Solders with Second Phase Dispersion : Microstructure, Interfacial Reaction and Thermal Fatigue", TMS Annual Meeting, USA San Antonio, Texas, March 12~16, 2006.

105. Naoya Hirata, "Fluid Flow Simulation for Surface Tension Dominant Process", The 9th Asian Foundry Congress, Hanoi, Vietnam, Oct. 15~18, 2005

106. H. Morito, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "Magnetic -field-induced Strain of Ni-Fe-Ga-Co Ferromagnetic Shape Memory Alloys", Tohoku University, Kyoto University, KAIST and GIST Joint Symposium on Materials Science & Engineering, Gwangju, Korea, August 18~20, 2005

107. T. Hagisawa, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Grain Growth and Microstructural Evolution of Liquid-particle Dispersion Structure in Iron Base Alloys", Tohoku University, Kyoto University, KAIST and GIST Joint Symposium on Materials Science & Engineering, Gwangju, Korea, August 18~20, 2005

108. T. Sasaki, H. Mitsui, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Phase Equilibria in

Fe-Nb-S Ternary System", Tohoku University, Kyoto University, KAIST and GIST Joint Symposium on Materials Science & Engineering, Gwangju, Korea, August 18~20, 2005

109. K. Tamura, J. Sato, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Phase Equilibria in the Co-Cr-Mo Ternary System", Tohoku University, Kyoto University, KAIST and GIST Joint Symposium on Materials Science & Engineering, Gwangju, Korea, August 18~20, 2005

110. W. Ito, T. Omori, K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "High Temperature Shape Memory Properties and fcc/hcp Martensitic Transformation in Co-Si-Alloys", Tohoku University, Kyoto University, KAIST and GIST Joint Symposium on Materials Science & Engineering, Gwangju, Korea, August 18~ 20, 2005

111. N. Hirata, K. Anzai, "Fluid Flow Simulation for Surface Tension Dominant Process", GIST/KAIST/Kyoto University/Tohoku University Joint Symposium on Advanced Materials, Gwangju Korea, August 18~ 20, 2005

112. Y. Cui, "Unification Study of the –phase Modeling in the Tantalum Relating Binaries", 第 2 回日中韓材料科学ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ太原 Jinci, Aug.9~14, 2005

113. Taichi Abe, Masato Shimono, Andreas Kundig, Hidehiro Onodera, "Thermodynamic modelling of the undercooled liquid in the Cu-Zr and Ni-Zr binary systems", ISMANAM, Paris, France, July 3~7, 2005

114. Y. Sutou, T. Omori, N. Koeda, K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, " Effect of Texture on Internal Friction of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys", ICOMAT2005 (International Conference on Martensitic Transformations), Shanghai, China, June 14~17, 2005

115. T. Omori, Y. Sutou, K. Oikawa, R. Kainuma, K. Ishida, "Co-Al Ferromagnetic Shape Memory Alloys with High Ms and Tc Temperature", ICOMAT2005 (International Conference on Martensitic Transformations), Shanghai, China, June 14~17, 2005

116. Y. Tanaka, Y. Hiumuro, Y. Sutou, R. Kainuma,K. Ishida, "Martensitic Transformation and Shape Memory Effect in ausaged Fe-Ni-Si-based Alloys", ICOMAT2005 (International Conference on Martensitic Transformations), Shanghai, China, June 14~17, 2005

117. Y. Imano, K. Oikawa, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Ishida, " Martensitic and Magnetic Transformations of Ni-Ga-Fe-Co Ferromagnetic Shape Memory Alloys", ICOMAT2005 (International Conference on Martensitic Transformations), Shanghai, China, June 14~17, 2005

118. S. Farjami, S. Suzuki and H. Kubo, "Crystallography and Elastic Energy Analysis of Thermoelastic Martensite in Cu-Zn Alloy", ICOMAT2005 (International Conference on Martensitic Transformations), Shanghai, China, June 14~17, 2005

119. R. Kainuma, K. Kobayashi, I. Ohnuma, K. Ishida, "Miscibility gap and stability of B2 phase in the Co-Al based ternary systems", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

120. I. Ohnuma, "Effect of the interaction between the chemical and the magnetic ordering on the phase equilibria of iron base alloys", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

121. Y. Sutou, T. Omori, N. Koeda, R. Kainuma, K. Ishida, "Effect of Texture on Internal Friction of Cu-Al-Mn Based Shape Memory Alloys", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams

of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

122. T. Omori, Y. Sutou, N. Koeda, R. Kainuma, K. Ishida, "FCC/HCP Martensitic Transformation and Shape Memory Effect in Co-Al Binary System", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

123. Y. Tanaka, Y. Himurro, Y. Sutou, R. Kainuma,K. Ishida, "Martensitic Transformation and Shape Memory Effect in ausaged Fe-Ni-Si-based Alloys", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

124. Y. Imano, K. Oikawa, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Ishida, "Martensitic and Magnetic Transformations of Ni-Ga-Fe-Co Ferromagnetic Shape Memory Alloys", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

125. M. Jiang, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "A Thermodynamic Description of a Multicomponent B2 Phase", ISPD (International Symposium on Phase Diagrams of Alloys andMicrostructural Control of Advanced Materials), Shenyang, China, June 11~13, 2005

126. Koyama and H.Onodera, "Computer Simulation of Phase Decomposition in Sm-Co-Cu Magnetic Alloy Based on the Phase-Field Method", Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials, Arizona, USA. May 29~June 3, 2005

127. I. Ohnuma, "Application of CALPHAD approach for Development of Cabide Despersion Carburized (CDC)Steels", CALPHAD XXXIIII, Maastricht, Netherlands, May 22~27, 2005

128. Taichi Abe, Masato Shimono, Hidehiro Onodera, "Thermodynamic modelling of the undercooled liquid by the regular associated solution model", CALPHADXXXIV, Maastricht, Netherlands, May 22~27, 2005

129. T. Tokunaga, H. Ohtani, M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of the Zr-Be system using thermochemical properties based on ab initio calculations", CALPHAD XXXIV, Maastricht, Netherlands, May 22~27, 2005

130. H. Ohtani, N. Hanaya, S. Teraoka, M. Abe, M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of the Fe-Ti-P ternary system", CALPHAD XXXIV, Maastricht, Netherlands, May 22~27, 2005

131. T. Abe, M. Shimono and H. Onodera, "Estimation of the driving force for crystallization from undercooled liquid in the Cu-Zr system", 15th symposium of the materials research society of Japan, Dec. 23~24, 2004

132. M. Ode, T. Abe, H. Murakami and H. Onodera, "Numerical Prediction of Fraction of Eutectic Phase in Sn-Ag-Cu Soldering using Phase-field Method", 15th symposium of the materials research society of Japan, Dec. 23~24, 2004

133. T. Koyama and H.Onodera: "Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cu-X (X=Ni,Mn) System Based on the Phase-field Method", The Fifth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, Beijing. Nov.2~5, 2004

134. M. Ikeda, M. Ode, H. Onodera and H. Murakami, "Diffusion behavior in Ni-Al-Ir system", Materials Solutions, Conference and Exposition, Columbus, USA, Oct.18~20, 2004

135. T. Tokunaga, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic Evaluation of Phase Equilibria and Glass Forming Ability in the Ti-Be System", Symposium on User Aspects of Phase Diagrams, Columbus, OH USA, Oct. 18~20, 2004

136. M.Ode, T.Abe, H.Murakami, H.Onodera, “Numerical prediction of fraction of eutectic phase in Sn-Ag-Cu soldering, ,6th Pacific Rim International Conference on Modeling of Casting and Solidification Processes”, China, August 8~11, 2004

137. T. Tokunaga, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic Evaluation of Phase Equilibria and Glass Forming Ability in the Fe-Si-B System", CALPHAD XXXIII, Krakow, Poland, May 25~30, 2004

138. H. Ohtani, M. Yamano, and M. Hasebe, "Thermodynamic Analysis of the Co-Al-C and Ni-Al-C Systems by Incorporating Ab initio Energetic Calculations into the CALPHAD Approach", CALPHAD XXXIII, Krakow, Poland, May 25~30, 2004

139. K. Tanaka, H. Kawaura, N. Matsumoto, K. Nishino, "Alloy Design of a Cost-Effective and Castable Heat-Resistant Iron Alloys", CALPHAD XXXIII, Krakow, Poland, May 25~30, 2004

140. T. Koyama, " Computer Simulation of Phase Transformations in Magnetic Materials Based on the Phase-Field Method", The 2003 Korea-Japan Symposium on "Current Issues on Phase Transformations", Busan, Korea Nov.r 21~22, 2003

141. T. Koyama and H. Onodera , "Computer Simulation of Phase Decomposition in Fe-Cr-Co Alloy Based on the Phase-Field Method", IUMRS-ICAM Oct. 8~10, 2003

③ ポスター発表 （国内会議） （国内会議 10件、国際会議 18件）

③ ポスター発表 （国内会議）

1. Y. Lin, Y. Takaku, I. Ohnuma and K. Ishida "The phase equilibrium of Cu-Ni-Sn ternary system at 400°C and 600°C ", 日本金属学会 2008 年秋期(第 143 回)講演大会, 熊本大学黒髪キャンパス, 2008 年 9 月 23 日～25 日
2. T. Koyama, "Phase-Field Simulation of Domain Microstructure Formation in Ferroelectric Material and Calculation of Dielectric Property", The Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, National Museum of Emerging Science and Innovation, 東京, 2008 年 6 月 3 日~7 日
3. T. Koyama, "Phase Field Simulation of Precipitation Relevant to Imperfection of Crystal", The 1st International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC1), Nagoya Congress Center, 名古屋, 2008 年 6 月 29 日~30 日
4. 諏訪嘉宏, 小山敏幸, 小野寺秀博, 齊藤良行, "粒子分散多結晶組織における異常粒成長の可能性",次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト報告会, 東京, 2007 年 7 月 13 日
5. 木村良, 大谷博司, 長谷部光弘, "Ti-Cr-Si3元系状態図の熱力学的解析",日本鉄鋼協会 第 152 回 2006 年秋季講演大会, 新潟, 2006 年 9 月 16 日~18 日
6. 小山敏幸 他, "Phase-field 法による組織・特性予測法の確立", 第 1 回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム, JST, 東京大学弥生講堂（一条ホール）, 2005 年 12 月 6 日~7 日
7. 知念響, 佐藤順, 大沼郁雄, 貝沼亮介,石田清仁, "Co-Cr-W3元系合金における相平衡",

日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会，広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日

8. 石川博康，小林恒誠，村上恭和，進藤大輔，貝沼亮介，石田清仁，"Ni-Mn-Ga-Al 系ホイスラー合金の相安定性と磁気特性",日本金属学会 2005 年秋期(第 137 回)講演大会，広島, 2005 年 9 月 27 日~30 日
9. 松本智史，大谷博司，長谷部光弘，"Nb-Ni-Zr3元系状態図の熱力学的解析"，日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会，福岡, 2005 年 6 月 10 日
10. 徳永辰也，大谷博司，長谷部光弘，"Ni-Fe-B3元系における相平衡"，日本金属学会・日本鉄鋼協会九州支部平成 17 年度合同学術講演大会，福岡, 2005 年 6 月 10 日

③ ポスター発表（国際会議）

1. K. Shinagawa, T. Omori, J. Sato, K. Oikawa, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, "Phase Equilibria and Microstructure on γ' Phase in Co-Ni-Al-W System", 2008 MRS (Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, USA, Dec.1~5, 2008
2. N. Tabata, M. Ishibashi, T. Suetake, T. Omori, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Yamauchi and K. Ishida, "Treatment of Ingrown Nails Using Cu-Al-Mn New Shape Memory Alloy", CIMITEC2008 (The 3rd International Conference "Smart Materials, Structures and Systems"), **Acireale**, Sicily, Italy, June 8~13, 2008
3. Y. Takaku, I. Ohnuma, R. Kainuma, X. J. Liu and K. Ishida, "Phase Equilibria and Thermodynamic Calculation for High Temperature Bi-based and Zn-based Solders", CALPHADXXXVII, Saariselkä, Finland, June 15~20, 2008
4. Y.-W. Cui, M. Jiang, I. Ohnuma, K. Oikawa, R. Kainuma, and K. Ishida, "Computational studies of phase diagram and diffusional mobility for Co-based high-temperature alloys", EUROMAT 2007 (10th European Congress on Advanced Materials and Processes), Nürnberg, Germany, Sep. 10~13, 2007
5. T. Omori, Y. Sutou, K. Ando, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Microstructure and Shape Memory Effect in Co-Al Alloys", Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8 , 2006
6. Y. Tanaka, Y. Sutou, K. Oikawa, T. Omori, R. Kainuma and K. Ishida, "Strain-induced Magnitization Change of Ferromagnetic Co-Ni-Al Shape Memory Alloy", Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8 , 2006
7. H. Morito, A. Fujita, K. Fukamichi, K. Oikawa, R. Kainuma and K. Ishida, "Aging Effects on Magnetic Properties and Crystal Structure in Ni-Fe-Ga-Co Alloys" Thermec2006 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), Vancouver, Canada, July 4~8, 2006
8. M. Ode, T.Abe and H.Onodera, "Numerical simulation of peritectic solidification of steel using the multi-phase-field model", 13th German-Japanese Workshop on Chemical Information, The Univ. of Tokyo, Japan, June 25~26, 2006
9. Jun Sato, Katsunari Oikawa, Ikuo Ohnuma, Ryosuke Kainuma and Kiyohito Ishida, "Experimental and Thermodynamic Study on Phase Equilibria of The Co-Mo Binary System", TOFA2006 (Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys), China, Beijing, June 18~23,

2006

10. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Phase-Field Modeling of Recrystallization - Effects of Second-Phase Particles on the Recrystallization kinetics", 3rd International Conference on Recrystallization and Grain Growth (Rex&GG 3), Jeju, Korean, June 6~12, 2007
11. T. Abe, M. Ode, C. Kocer, Y. Mitarai and H. Murakami and T. Hara, "Thermodynamic Assessment of the Ir-based systems", CALPHAD, Pennsylvania USA, May, 2007
12. Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera, "Phase-field modelling of recrystallization", 13th German-Japanese Workshop on Chemical Information, Tokyo, May 25~27, 2006
13. T. Abe,M. Shimono and H.Onodera, "Instability of liquid and glass-forming ability of ternary alloys", 13th german-japanese workshop on chemical information May, 2006
14. Katsunari Oikawa, Hajime Mitsui and Kiyohito Ishida, "A Thermodynamic Database for Fe-Cr-Mn-Ni-Ti-S-C-N system Microalloying for New Steel Processes and Applications", Donostia-San Sebastian, SPAIN, Sep. 2005
15. T. Koyama and H. Onodera, "Modeling of Phase Transformations and Microstructure Changes in Real Materials Based on the Phase-field Method", World Materials Research Institute Forum, NIMS, Tsukuba, June 6~7, 2005
16. N. Hanaya, Y. Kou, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of the Fe-Nb-P ternary system", CALPHAD XXXIV, Maastricht, The Netherlands, May 22~27, 2005
17. S. Matsumoto, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of phase equilibria in the Nb-Ni-Ti system", CALPHAD XXXIV, Maastricht, The Netherlands, May 22~27, 2005
18. K. Doi, S. Ono, H. Ohtani and M. Hasebe, "Thermodynamic Study of Phase Equilibria in the Sn-Zn-Ti Ternary System", Symposium on User Aspects of Phase Diagrams,. Columbus, OH USA, Oct. 18~20, 2004

（3） 特許出願

①国内出願（28件）

②海外出願（10件）

（4） 受賞等

①受賞

1.	小野寺秀博	社団法人日本鉄鋼協会・学術功績賞，「合金の組織と特性の予測」	2009 年 3 月 28 日
2.	貝沼亮介	社団法人日本金属学会･増本量賞，「優れた特徴を有する新規形状記憶合金の開発」	2009 年 3 月 28 日
3.	及川勝成	社団法人日本金属学会･功績賞,「熱力学データベースの構築と計算状態図の材料設計への応用」	2009 年 3 月 28 日
4.	宮本隆史	社団法人日本金属学会第 7 回東北支部研究発表大会･奨励賞(講演部門) 「コンビナトリアル法を用いた Ni-Mn-In 3 元系等温状態図の決定」	2008 年 11 月 29 日
5.	高久佳和	Components Packagin and Manufacturing Technology Society, IEEE CPMT Young Award 「Bi-base Composite Solder for Mounting Powder Semiconductor Devices, ICEP 2007」	2008 年 6 月 10 日
6.	村上俊之 冨田邦和 白神哲夫 及川勝成 石田清仁	社団法人日本材料学会･技術賞 「AISI12L14 代替非鉛快削鋼の開発」	2008 年 5 月 24 日
7.	大沼郁雄	第 5 回 本多記念奨励賞 「計算機支援による材料の組織設計に関する研究」	2008 年 5 月 9 日
8.	小山敏幸	社団法人日本鉄鋼協会･学術記念賞(西山記念賞)	2008 年 3 月 26 日
9.	安藤佳祐	財団法人青葉工学振興会第 11 回及川研究奨励賞 「Co 基高温強磁性形状記憶合金の開発」	2008 年 1 月 28 日
10.	寺田賢二郎	社団法人日本機械学会計算力学部門･業績賞(第 85 期)	2007 年 11 月 27 日
11.	及川勝成	トムソンサイエンティフィック社 Leading Japanese Scientists in Emerging Research Fronts 賞 「The development of the new magnetic shape memory alloys」	2007 年 9 月 19 日
12.	徳永辰也 松本智史 大谷博司 長谷部光弘	社団法人日本金属学会論文賞「若手講演論文部門」 「Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Nb-Ni-Ti-Zr Quaternary System 」, Materials Transactions 48 (2007) pp.89-9	2007 年 9 月 19 日

13.	石田清仁	第 4 回本多記念フロンティア賞 「ミクロ組織設計による先端材料の開発」		2007 年 5 月 11 日
14.	車谷麻緒 寺田賢二郎	計算工学会 論文賞 「多重被覆モデリングによる有限被覆法 -非均質脆性材料の不連続面進展解析-」, 計算工学会論文集, Vol.2006, 論文番号 20060029, 2006		2006 年
15.	伊東 航	財団法人青葉工学振興会第 10 回及川研究奨励賞 「磁場誘起変態を利用した新型 Ni 基メタ磁性形状記憶合金の開発」		2006 年 12 月 20 日
16.	及川勝成	社団法人日本金属学会・村上奨励賞		2006 年 9 月 16 日
17.	石田清仁	社団法人日本金属学会 功労賞(学術部門)		2006 年 9 月 16 日
18.	小山敏幸	社団法人日本金属学会・論文賞[まてりあ論文部門] 「Phase-field 法に関する最近の進展と今後の展望」		2006 年 9 月 16 日
19.	大森俊洋 須藤祐司 貝沼亮介 石田清仁	Copper'06, Best Paper Aword, 「Development of Cu-al-Mn-based Shape Memory Alloys」		2006 年 9 月 14 日
20.	小池淳一 柴田英毅 清水紀嘉 高橋新吾	半導体理工学研究センター, 第 4 回 STARC 共同研究賞		2006 年 9 月
21.	小池淳一 柴田英毅 清水紀嘉 高橋新吾	IITC Lerme Best Paper Award		2006 年 6 月
22.	及川勝成	第 4 回 本多記念奨励賞 「材料組織の設計・制御による Fe 基および Co 基多元系合金の機能開発」		2006 年 5 月 18 日
23.	石田清仁	文部科学省科学技術賞研究部門 「鉛フリー環境調和型材料に関する研究」		2006 年 4 月 18 日
24.	及川勝成 村上俊之 白神哲夫 石田清仁	社団法人日本機械学会東北支部技術研究賞(2005 年度) 「SAE/2L/4代替非鉛快削鋼の開発」		2006 年 3 月 14 日
25.	小山敏幸	社団法人日本金属学会・功績賞[組織部門]		2006 年 3 月
26.	萩澤武仁	財団法人青葉工学振興会・第 10 回及川奨励賞 「液相分散組織の結晶粒成長に関する研究」		2005 年 12 月 14 日

27.	王　継傑 須藤祐司 貝沼亮介 石田清仁 大森俊洋	社団法人銅及び銅合金技術研究会・論文賞 「マルテンサイト変態制御による新しいタイプの Cu 基インバー合金の開発」	2005 年 11 月 4 日
28.	及川勝成 石田清仁 清水哲也, 江幡貴司	社団法人発明協会・21世紀発明奨励賞 「環境調和型鉛フリー快削合金材料の開発」	2005 年 7 月 1 日
29.	劉　興軍 大沼郁雄 貝沼亮介 石田清仁	APDIC Best Paper Award 「Experimental Investigation and Thermodynamic Calculation of the Phase Equilibria in the Cu-Sn and Cu-Sn-Mn Systems」	2005 年 5 月 28 日
30.	貝沼亮介	社団法人日本鉄鋼協会・西山記念賞	2005 年 3 月
31.	田中優樹	財団法人青葉工学振興会・第 9 回及川奨励賞 「高性能強磁性形状記憶合金の開発」	2004 年 12 月
32.	森戸春彦	財団法人青葉工学振興会・第 9 回及川奨励賞 「シングルバリアントに制御した新強磁性形状記憶単結晶合金の双晶磁歪のメカニズムに関する研究」	2004 年 12 月
33.	萩澤武仁	社団法人日本鉄鋼協会・努力賞（ポスター部門）	2004 年 9 月
34.	貝沼亮介	社団法人日本金属学会・功績賞	2004 年 9 月
35.	須藤祐司	社団法人日本金属学会・若手奨励賞	2004 年 9 月
36.	大谷博司 山野万紀 長谷部光弘	社団法人日本鉄鋼協会・澤村論文賞 「Thermodynamic analysis of the Fe-Al-C ternary system by incorporating ab initio energetic calculations into the CALPHAD approach」, ISIJ International,ernational 44 (2004) pp.1738-1747.	2004 年 9 月

②新聞報道

1. 「巻きヅメ矯正具　装着がラクラク」（平成 20 年 12 月 9 日：日経産業新聞）
2. 「東北大、成形加工性に優れた銅系形状記憶合金製の矯正器具を開発」
   （平成 20 年 11 月 4 日：日経 BP）
3. 「巻きづめ合金器具で矯正」（平成 20 年 3 月 27 日：河北新報）
4. 「燃焼でチタン炭硫化物製造」（平成 19 年 10 月 2 日：日刊工業新聞）
5. 「硫化物の人工合成に成功」（平成 19 年 9 月 13 日：日刊産業新聞）
6. 「水注いで簡単『水素』 東北大チーム、合金を開発」（平成 19 年 9 月 14 日：朝日新聞）
7. 「新アルミ合金を開発　室温でも水素発生」（平成 19 年 9 月 7 日：日刊工業新聞）
8. 「アルミ処理　水に浸せば水素　新合金携帯電池に道」（平成 19 年 9 月 7 日：讀賣新聞）

9. 「水を注ぐだけで水素発生　安価なアルミ合金開発」（平成 19 年 9 月 7 日：鉄鋼新聞）
10. 「常温水と反応　水素発生」（平成 19 年 9 月 7 日：日刊工業新聞）
11. 「水注げば簡単に水素発生　アルミ合金を開発」（平成 19 年 9 月 7 日河北新報）
12. 「水に浸せば水素製造　被膜防ぐ技術開発」（平成 19 年 9 月 7 日：日本経済新聞）
13. 「東北大パラジウム系で開発　形状記憶材料高造影性・細径化も」
（平成 19 年 8 月 21 日：日刊産業新聞）
14. 「パラジウム主成分東北大が形状記憶合金　X 線低透過高い耐食性　医療機器への応用期待」
（平成 19 年 8 月 21 日：日刊工業新聞）
15. 「生体用 X 線造影性に富む Pd 系形状記憶材料」（平成 19 年 8 月 17 日：科学新聞）
16. 「チタンの炭硫化物　燃焼合成法で生成」（平成 19 年 6 月 26 日：鉄鋼新聞）
17. 「CO_2減らす新合金開発」（平成 18 年 4 月 9 日：毎日新聞）
18. 「形状記憶合金銅系で実用化」（平成 18 年 6 月 23 日 ： 日刊工業新聞）
19. 「1200 度耐熱　超合金」（平成 18 年 4 月 9 日 ： 讀賣新聞）
20. 「コバルト-耐熱性高い合金に」（平成 18 年 4 月 7 日：日経産業新聞）
21. 「超耐熱の新合金実現可能性確認（平成 18 年 4 月 7 日：日本経済新聞）
22. 「1200 度に耐える新合金―エンジンなど応用期待」（平成 18 年 4 月 7 日：河北新報）
23. 「1200 度でも硬い新合金―発電機器で省エネ期待」（平成 18 年 4 月 7 日：朝日新聞）
24. 「超耐熱の新合金開発―コバルト基で高温高強度」（平成 18 年 4 月 7 日：日刊工業新聞）
25. 「Ni 基上回る高温強度―Co 基スーパーアロイ」（平成 18 年 4 月 7 日：化学工業新聞）
26. 「1500℃の超高温に使用可能―超耐熱新合金を開発」（平成 18 年 4 月 10 日：鉄鋼新聞）
27. 「磁場変化で大きな歪みと力発生―新型形状記憶合金開発」
（平成 18 年 3 月 31 日：科学新聞）
28. 「形状記憶合金、超強磁性製品を開発―従来比50倍の応力発生」
（平成 18 年 2 月 23 日：鉄鋼新聞）
29. 「磁場で大きな歪み―新磁性形状記憶合金を開発」（平成 18 年 2 月 23 日：日刊工業新聞）
30. 「ゴムのような鉄系記憶合金―10～13％伸び縮み」（平成 18 年 1 月 13 日：日刊工業新聞）
31. 「ゴムのような鉄系記憶合金：室温で 10%超伸縮―板、パイプなど形成容易」
（平成 18 年 1 月 10 日：鉄鋼新聞）
32. 「東北大、10%と大幅な伸びを示す鉄系超弾性型形状記憶合金を開発」
（平成 18 年 1 月 7 日：日経 BP　BizTech　HP）
33. 「銅系形状記憶合金―制振性能 1.5 倍以上に―振動・騒音を吸収―自動車部品などに応用」
（平成 17 年 3 月 11 日：日刊工業新聞）
34. 「鉛フリー高温はんだ開発、産学連携し実用化へ―融点 280－320°C」
（平成 15 年 12 月 9 日：日刊工業新聞）
35. 「高速計算の半導体向けはんだ―鉛使わず高温対応」
（平成 15 年 12 月 5 日：日経産業新聞）
36. 「300°C の高温用鉛フリーはんだを開発し産学連携コンソーシアム形成へ」
（平成 15 年 12 月 5 日：日経 BP　BizTech　HP）

③その他

（5） その他特記事項

1. 出版物

寺田賢二郎, "鉄鋼材料の微視的非均質性と巨視的機械的性質の相互関係－均質化法に基づく数値材料実験－", 塑性と加工（日本塑性加工学会誌）, 第 49 巻, 第 564 号, 13-18, (2008)

2. 企業との契約

国内　7社、海外2社

3. 商品化

熱力学データベース　3件

§7 研究期間中の主な活動

ワークショップ・シンポジウム等

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成20年12月12日～13日	チーム内研究打合せ	箱根静雲荘	約22名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成20年度前半研究成果及び最終年度研究計画打合せ
平成19年12月14日～15日	チーム内研究打合せ	箱根静雲荘	22名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成19年度前半研究成果及び後半研究計画打合せ
平成18年12月8日～9日	チーム内研究打合せ	箱根静雲荘	26名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成18年度前半研究成果及び後半研究計画打合せ
平成18年8月29日	"Magnetic Shape Memory Phenomena and Metamagnetic Phase Transition" 磁性形状記憶とﾒﾀ磁性相転移	東北大学大学院工学研究科総合研究棟	約50名	最近の磁性形状記憶合金の進展についての国際ﾜｰｸｼｮｯﾌﾟであり、英国ラフバラ大学のZiebeck教授の基調講演と海外2件、国内13件の発表があった。
平成18年1月31日	CREST公開ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑ 「戦略的材料の最前線―ｴﾈﾙｷﾞｰ・情報・ﾅﾉﾃｸﾉﾛｼﾞｰの革新的材料―」	KKRホテル東京	約100名	CRESTﾌﾟﾛｼﾞｪｸﾄの材料関係4ﾁｰﾑが焦点を合わせ、特に企業向けにｼﾞｮｲﾝﾄｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑを開催した。本ﾌﾟﾛｼﾞｪｸﾄの内容を説明し、産学による実用化研究内容をｱﾋﾟｰﾙした。
平成17年9月30日～10月1日	チーム内研究打合せ	KKRホテル広島	18名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成17年度前半研究成果及び後半研究計画打合せ
平成17年3月16日	チーム内研究打合せ	JST シミュレーション事務所	17名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成17年度研究打合せ
平成16年9月30日～10月1日	チーム内研究打合せ	秋田千秋会館	17名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成16年度前半研究成果及び後半研究計画打合せ
平成16年5月14日～15日	チーム内研究打合せ	箱根静雲荘	18名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成15年度研究成果及び平成16年度研究計画打合せ
平成16年1月9日～10日	チーム内研究打合せ	東北大学鳴子保養所	18名	各ｸﾞﾙｰﾌﾟとの平成16年度～20年度の研究計画打合せ

§8 結び

熱力学データベース、Phase-field シミュレーションは、当初の目標を十分達成したと考えている特に本研究で行った Pb フリー高温はんだの研究に刺激され、ヨーロッパではこれに関する COST MP0602 の新しいプロジェクトが今年から発足している。またこれらの研究を通した出願した特許、企業との連携も当初計画をはるかに超えた状況と考えられる。材質予測シミュレーションの中の機械的性質については、当初計画より若干遅れたが、有限要素の均質化法のシミュレーションを行うグループが新しく参加し大きな成果が得られた。また Co 基磁性材料のデータベース

構築のために Co-W-X 合金の状態図を実験中に $L1_2$ 構造の新しい3元化合物 Co_3(Al、W)を発見した。Science に発表した。当初磁性材料として Co 基合金を研究していたが、耐熱合金としても極めて有望である。現在米国をはじめ海外でも、本成果が発端となって Co 基スーパーアロイの研究が活発に行われている。さらに Ni 基強磁性形状記憶合金のシミュレーションと実験を行っている過程で、母相が強磁性でマルテンサイトが弱磁性の従来にないメタ磁性型形状記憶 Ni-Mn-In 基合金を発見した。本成果は、海外でも高く評価され、ドイツ、ロシア、インドでは強磁性形状記憶合金の新しいプロジェクトが発足し活動が始まっている。

本研究領域である「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」の中の実用的観点については、すでに国内企業7社、海外企業2社と契約を締結を行った。またデータベースは3件商品化している。

本研究で構築したシミュレーションは、多くの人に利用してもらう事が重要であると考えている。その意味で熱力学データベースは、材料開発に有用な武器として、今後国内外でさらに利用されると考えられる。また材料組織形成計算統合化システムは、多くの機能を持ったプログラムとして完成予定である。このシステムは、企業だけでなく、大学の材料教育にも利用できるので大いに期待できる。

本研究終了後、熱力学データベース、フェイズフィールド法、均質化法、統合化プログラムについてセミナー等を通じて紹介し、広く利用していただく様にしたい。本プロジェクトは、かなり自由に研究費が利用出来たので、博士課程の学生、ポスドク、助教等若い人が参加し、研究内容としても、また人材育成にも大きな成果を挙げたと考えている。